FISICA
AL ALCANCE DE TODOS

FISICA Y GEOMETRIA DEL DESORDEN

A. Efros

EDITORIAL MIR MOSCU



FISICA AL ALCANCE DE TODOS

FISICA AL ALCANCE DE TODOS

А. Л. Эфрос

ФИЗИКА И ГЕОМЕТРИЯ БЕСПОРЯДКА

МОСКВА «Наука»

FISICA AL ALCANCE DE TODOS

FISICA Y GEOMETRIA DEL DESORDEN

A. Efros

Traducido del ruso
por Stanislav N. Beloúsov

EDITORIAL MIR MOSCU



A nuestros lectores:

"Mir" edita libros soviéticos traducidos al español, inglés, francés, árabe y otros idiomas extranjeros. Entre ellos figuran las mejores obras de las distintas ramas de la ciencia y la técnica: manuales para los centros de enseñanza superior y escuelas tecnológicas; literatura sobre ciencias naturales y médicas. También se incluyen monografías, libros de divulgación científica y ciencia-ficción.
Dirijan sus opiniones a la Editorial Mir, I Rizhski per., 2, 129820, Moscú, I-100, GSP, URSS.

Impreso en la URSS

на испанском языке

ÍNDICE

PREFACIO

La ciencia que constituye el objeto de este libro es muy joven. Sus ideas fundamentales fueron enunciadas solamente en el año 1957 en la obra de S. R. Broadbent y J. M. Hammersley, científicos ingleses. Dicha obra surgió del modo siguiente. A mediados de los años cincuenta S. R. Broadbent se dedicaba a la elaboración de caretas antigás para las minas, según la tarea encomendada por la Asociación Británica de Investigación del Uso de la Hulla. En el curso de los trabajos él chocó con un problema interesante que llamó la atención del matemático J. M. Hammersley.

El principal elemento de la careta antigás es el carbón, a través del cual debe pasar el gas. En el mismo hay poros que se unen unos con otros de manera extraña, formando una especie de laberinto enredado. El gas puede penetrar en esos poros adsorbiéndose (sedimentándose) en sus superficies. Resultó que si los poros son bastante anchos y están bien enlazados entre sí, el gas penetra profundamente en el filtro de carbón. En caso contrario el gas no penetra más allá de la superficie del carbón. El movimiento del gas por el laberinto es un proceso de nuevo tipo que difiere considerablemente del fenómeno de difusión bien conocido en física.

S. R. Broadbent y J. M. Hammersley llamaron tales fenómenos "*procesos de percolación*" (en inglés *percolation processes*. La palabra percolación significa infiltración). La teoría que estudia los fenómenos de tal género adquirió el nombre de *teoría de percolación*.

En el transcurso de los 30 años que pasaron desde el primer trabajo de S. R. Broadbent y J. M. Hammersley se aclaró que la teoria de percolación es necesaria para comprender un extenso círculo de fenómenos relacionados principalmente con la física y la química. Es probable que el campo de aplicación de la teoría de percolación, mejor elaborado actualmente, son las propiedades eléctricas de los sistemas desordenados, tales como los semiconductores amorfos y semiconductores cristalinos con impurezas, o bien los materiales que son una mezcla de dos sustancias diferentes: un material dieléctrico y un metal.

Los fenómenos descritos por la teoría de percolación pertenecen a los llamados *fenómenos críticos*. Estos se caracterizan por el *punto crítico* en el cual ciertas propiedades del sistema cambian de manera brusca. A los fenómenos críticos también pertenecen las transiciones de fase de segundo género (por ejemplo, cuando un metal pasa del estado normal al estado de superconductividad al bajar la temperatura). La física de todos los fenómenos críticos es muy peculiar y tiene rasgos comunes. El más importante de ellos consiste en que cerca del punto crítico el sistema parece como si se dividiera en bloques de propiedades diferentes, además, las dimensiones de algunos de esos bloques crecen ilimitadamente al acercarse al punto crítico. Los contornos de los bloques en este caso son eventuales. En ciertos fenómenos toda la configuración varía caóticamente en función del tiempo a expensas del movimiento térmico; en otros fenómenos esa configuración permanece congelada, pero cambia al pasar de una muestra a otra. Los bloques se hallan dispuestos desordenadamente, por lo cual, al mirar la fotografía instantánea del sistema, es difícil ver algunas regularidades. Sin embargo, "por término medio" esta geometría, que puede ser llamada "*geometría del desorden*", posee propiedades absolutamente determinadas.

Las propiedades físicas siempre están inseparablemente enlazadas con la geometría. Por ejemplo, las propiedades físicas de los cristales se determinan conforme a la geometría de las redes cristalinas. Exactamente igual, una serie de propiedades del sistema situado cerca del punto crítico, se determinan con arreglo a la "geometría del desorden". Lo más interesante es que gracias a los grandes tamaños de los bloques, dicha geometría no depende, en realidad, de la estructura atómica de la sustancia y, por esta razón, posee propiedades universales idénticas para muchos sistemas completamente diferentes. De aquí deriva la universalidad de las propiedades físicas que se manifiestan en la periferia de los puntos críticos.

Tal tipo de enlace entre la física y la geometría puede observarse dentro de los márgenes de la teoría de percolación, en lo cual precisamente consiste una de las tareas principales de este libro. La referida teoría puede ser enunciada mediante imágenes geométricas sencillas, tales como rejillas de alambre, bolas y redes cristalinas. Ella no contiene nociones de temperatura y por eso da la posibilidad de explicar los fenómenos críticos de tal modo que sean comprendidos incluso por los lectores no iniciados en la física estadística.

La teoría de percolación, al igual que toda la teoría de los fenómenos críticos, aún no se transformó en una ciencia exacta

desde el punto de vista matemático. Muchas afirmaciones importantes siguen sin demostrar y algunas cuestiones no han sido aclaradas. En los casos cuando existen demostraciones estrictas pero que son complicadas, en este libro las mismas se han sustituido por razonamientos que, más bien, no demuestran, sino que explican el resultado. No obstante, el autor siempre ha tratado de separar exactamente las afirmaciones demostradas de las no demostradas.

El libro contiene la exposición detallada de la teoría de percolación, así como de sus diversas aplicaciones. Esa teoría ha sido construida del modo siguiente. La definición de lo que llamamos teoría de percolación y cuáles son los procesos que ella describe, lo hemos dejado hasta alcanzar la última página del libro. Dicha definición debe incluir tantos conceptos complejos, que no tiene sentido enunciarla al principio. Casi cada capitulo contiene algún problema concreto, cuyo examen conduce al problema de la teoría de percolación. Se supone que después de leer varios capítulos, el lector ha de sentir lo que tienen de común los diversos problemas de la teoría de percolación y qué relación tiene con eso el titulo del libro.

Por regla general, los problemas examinados son importantes campos de aplicación de la teoría de percolación. Pero algunos de ellos (proyecto de un huerto frutal, en el capítulo 5, y propagación de rumores, en el capitulo 11) tienen carácter ilustrativo e incluso algo irónico.

En el libro se ofrece la información necesaria para comprender el material de la teoria elemental de las probabilidades. En el capitulo 1 se dan nociones generales sobre las probabilidades y las variables aleatorias. En el capítulo 2 se exponen las reglas de adición y multiplicación de las probabilidades y se introduce la función de distribución. El libro puede ser leído en una variante simplificada, al excluir el capitulo 2 y otros capitulos y apartados marcados con dos asteriscos. Claro está que en este caso el lector será privado de la posibilidad de seguir las deducciones de ciertos resultados cuantitativos contenidos en esos apartados, así como en muchos ejercicios. Pero tal hecho no obctaculizará la comprensión (posiblemente algo simplificada) de los demás apartados y capitulos.

Los ejercicios expuestos en el libro deben desempeñar un papel importante al asimilar las nuevas ideas. Por lo común, ellos son muy sencillos y es recomendable resolverlos sin la consulta previa del apartado “Respuestas y soluciones” (salvo los casos cuando eso haya sido especialmente estipulado).

El autor

Primera parte
PROBLEMA DE LOS NUDOS

Capítulo I
UMBRAL DE PERCOLACIÓN

DOS SABIOS TIJERETEAN LA REJILLA PANTALLA

No es frecuente el hecho de que en las revistas científicas actuales aparezcan informes acerca de experimentos cuyo objeto es, por ejemplo, un pedazo de rejilla pantalla ordinaria comprada – con fines poco comunes [1] – en la ferretería más cercana. Y aunque el artículo de B. P. Watson y P. L. Leath, físicos norteamericanos, aparecido en la revista "Physical Review" de 1974, no era, ni mucho menos, el primer trabajo en el campo de la teoría de percolación, nuestro relato comenzará precisamente por este artículo.

El pedazo de rejilla con el cual trabajaban B. P. Watson y P. L. Leath era de forma cuadrada y contenía $137 \times 137 = 18\,769$ nudos de $^1/_4$ de pulgada = 6,35 mm de distancia entre los nudos vecinos. Los investigadores soldaron electrodos de cobre en dos lados opuestos del cuadrado y conectaron la rejilla al circuito eléctrico (fig. 1, *a*) para medir su resistencia. Seguidamente comenzaron a bloquear cada nudo y a estudiar la resistencia eléctrica conforme a la cantidad de nudos bloqueados. Como se muestra en la figura 1, *b*, *c*, el bloqueo del nudo consistía solamente en que mediante alicates se cortaban los cuatro alambres enlazados con ese mismo nudo.

Cada nuevo nudo sometido a bloqueo se elegía arbitrariamente entre los nudos antes intactos. En principio, para esto podríamos escribir las coordenadas de cada nudo en papeles individuales, meter todos esos papeles en una gorra, mezclarlos bien y sacarlos uno por uno. Pero al disponer de gran cantidad de nudos, tal procedimiento (al igual que otros métodos mecánicos de sorteo) es muy incómodo y por eso los científicos utilizaban la sucesión aleatoria de las coordenadas de los nudos, establecida por el ordenador. Más adelante describiremos detalladamente de qué

[1] La designación directa de la rejilla pantalla consiste en proteger diversos aparatos de radio contra las perturbaciones eléctricas.

manera podemos "obligar" al ordenador a que genere números aleatorios, pero mientras tanto, sin ningún perjuicio para el entendimiento, podemos sustituir mentalmente ese ordenador por una gorra.

Claro está que a medida que aumentaba el número de nudos bloqueados, disminuía la electroconductibilidad de la rejilla. (Llámase electroconductibilidad la magnitud contraria a la resistencia. Esta última se mide en ohmios (Ω), mientras que la electroconductibilidad se mide en ohmios inversos (Ω^{-1}).) Además, si designamos por x la relación entre el número de nudos no bloqueados y el número total de nudos (137^2), entonces, con

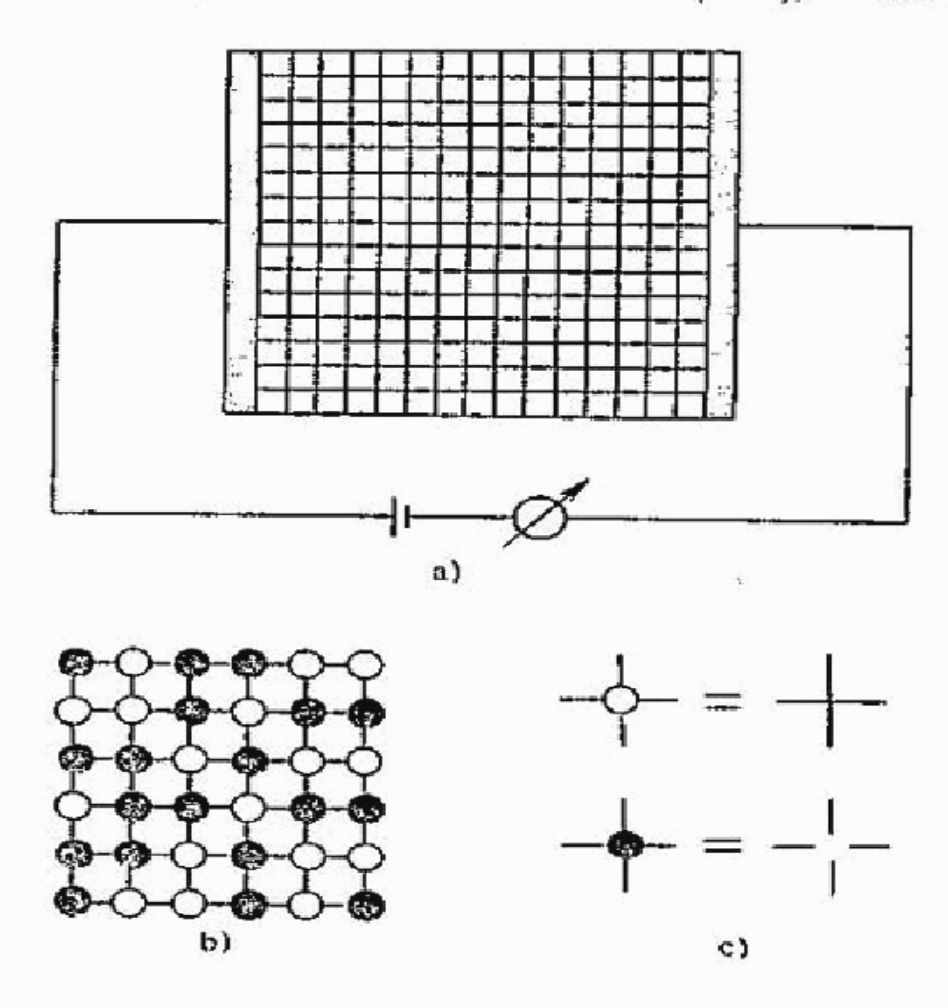


Fig. 1. Esquema del experimento de B. P. Watson y P. L. Leath. *a)* Rejilla inicial. La cantidad de nudos en la figura está reducida considerablemente; *b)* pedazo de la rejilla con nudos bloqueados. Los nudos bloqueados se muestran con círculos oscuros, mientras que los no bloqueados, con círculos claros; *c)* el nudo oscuro significa la ruptura del contacto entre los cuatro alambres que atan el nudo, el nudo claro conserva el contacto. A través de los nudos oscuros la corriente eléctrica no fluye en ninguna dirección, por los claros la corriente fluye en cualquier dirección.

cierto valor de x, que en adelante llamaremos *valor de umbral* (crítico) o *umbral de percolación* y que designaremos por x_c, la electroconductibilidad se reducía a cero. Esto ocurría cuando era cortada la última vía que unía los electrodos izquierdo y derecho. La determinación de la magnitud x_c era precisamente uno de los propósitos del experimento. Fue establecido que $x_c = 0{,}59$.

Es probable que la primera cuestión que requiere explicación consiste en lo siguiente: ¿es la magnitud x_c una variable aleatoria y no reproducible de un experimento a otro, o es una magnitud absolutamente determinada? Supongamos que hemos repetido el experimento utilizando otro pedazo de rejilla pantalla y aprovechando otra secuencia arbitraria de los nudos sujetos a bloqueo. El sentido común nos dicta que en vista de que en cada etapa toda la configuración de los nudos bloqueados y enteros en el segundo experimento no se parece en nada a lo que tuvo lugar en el primer experimento, la ruptura de la última vía que unía los electrodos también ha de ocurrir con otro valor de x, por eso el valor de x_c obtenido en el segundo experimento debe ser diferente. Esto es correcto sin duda alguna.

El valor de umbral de x_c en el experimento examinado es una *variable aleatoria*. Como tal tipo de magnitudes figurarán por doquier en las páginas de este libro, es útil aclarar desde el principio:

¿QUÉ ES UNA VARIABLE ALEATORIA?

En la matemática así se llama la variable de la cual se sabe qué valores ésta puede adquirir y con qué frecuencia la misma adopta uno u otro valor, pero que no se sabe (y no puede saberse dentro de los márgenes de un problema matemático dado) qué valor precisamente ella adquirirá en cualquier caso concreto.

He aquí un ejemplo clásico de variable aleatoria: lancemos sobre la mesa un cubo pequeño (dado) hexaédrico con números en cada una de sus caras. La variable aleatoria será el número de la cara que resulte dirigida hacia arriba. Tal variable llámase *discreta*, ya que ella sólo adopta valores determinados (en este caso son seis: 1, 2, 3, 4, 5 y 6). Es imposible predecir de antemano qué número precisamente obtendremos en un experimento concreto (es decir, en un lanzamiento dado), pero podemos pronosticar la *probabilidad* de obtener un número determinado (por ejemplo, 4). Supongamos que se hizo cierto número de experimentos igual a Q, con la particularidad de que el número 4 tuvo la suerte en Q_4 casos. La relación Q_4/Q se denomina *frecuencia relativa de aparición de un valor dado de la variable aleatoria* (del número 4). Si el número total de experimentos no es muy grande, esta relación oscila: si hacemos

una serie más de experimentos Q, en esta nueva serie la relación Q_4/Q puede ser completamente distinta. Pero al aumentar el número Q de experimentos, dichas oscilaciones se hacen cada vez menores. El límite hacia el cual tiende la frecuencia relativa de aparición de un valor dado de la variable aleatoria, llámase *probabilidad* de este valor.

Designemos por $P(4)$ la probabilidad de aparición del número 4. Si el cubo es "honesto", es decir, si todas sus caras son iguales, es fácil predecir el valor $P(4)$. Cualquiera de las seis caras del cubo debe dirigirse hacia arriba, por término medio, igual número de veces, por eso si el número Q es grande, $Q_4/Q = Q_3/Q = \ldots = {}^1/_6$. Así pues, las probabilidades de aparición de todos los números son iguales y equivalen a ${}^1/_6$.

Por consiguiente, con un número muy grande de lanzamientos, la eventualidad pasa a segundo plano cediendo su lugar a la regularidad, es decir, a la simetría de las caras del cubo.

VALOR MEDIO Y VARIANZA

Volvamos al experimento con la rejilla protectora. Fue aclarado que en vista de que en el experimento se utilizó la sucesión arbitraria de los nudos bloqueados, la concentración crítica x_c, con la cual se interrumpe la corriente entre los electrodos izquierdo y derecho, también es una variable aleatoria y es imposible pronosticar con anticipación a qué es igual ésta en cada experimento concreto.

El enfoque teórico de esta cuestión puede consistir en estudiar las propiedades "medias" de la variable x_c, es decir, las propiedades que se revelan en un número bastante grande de experimentos que se ejecutan en condiciones idénticas. Dichas condiciones son, en primer lugar, el número completo de nudos de la rejilla $\mathcal{N}$ (137^2 en el experimento descrito anteriormente), y en segundo lugar, las propiedades del generador de números aleatorios, el cual prefija la sucesión arbitraria de los nudos sujetos a bloqueo. El hecho de que las propiedades del generador no deben variar de un experimento a otro, no significa de ninguna manera que las sucesiones de los nudos sujetos a bloqueo deben ser iguales. (¡Entonces también serían iguales todos los valores de x_c!) Solamente es necesario que en todos los experimentos se emplee el mismo procedimiento para crear la sucesión arbitraria de los nudos que han de ser bloqueados (por ejemplo, una gorra con papeles).

Tras realizar Q experimentos con una rejilla pantalla de $\mathcal{N}$ nudos, obtendremos Q valores de x_i, donde i es el número del experimento. Por ejemplo, x_{15} significa x_c, que apareció en el

décimoquinto experimento. El más importante de los valores medios es la media aritmética $\bar{x}_Q$, que se obtiene sumando todos los valores de x_i y dividiendo esa suma por el número Q de experimentos:

$$\bar{x}_Q = \frac{x_1 + x_2 + \ldots + x_Q}{Q}. \quad (1)$$

La raya sobre la letra, así como el indice Q, significan que han sido promediados los resultados de Q experimentos. La variable $\bar{x}_Q$ sigue siendo aleatoria. Si efectuamos una serie más de Q experimentos en esas mismas condiciones y, según sus resultados, calculamos de nuevo el valor de $\bar{x}_Q$, éste resultará algo diferente. Sin embargo, cuanto mayor sea el número de experimentos en la serie Q, tanto menos se diferenciarán uno de otro los valores medios tomados de diversas series. El hecho es que *las oscilaciones aleatorias de las variables x_i se compensan recíprocamente en total, de tal modo que al aumentar el número Q, la variable $\bar{x}_Q$ tiende a cierto valor que no depende de Q* pero que es función de las condiciones en las cuales se realizaron los experimentos. Este valor límite se denomina *valor medio de la variable aleatoria.* (En la teoría de las probabilidades, dicho valor límite llámase también *esperanza matemática* de la variable aleatoria, pero nosotros no utilizaremos este término.)

Designemos por $x_c(\mathcal{N})$ el valor medio del umbral de percolación de una rejilla protectora compuesta por $\mathcal{N}$ nudos. La variable $x_c(\mathcal{N})$ no es aleatoria, sino *cierta*. Su dependencia de $\mathcal{N}$ es una regularidad sobre la cual debemos reflexionar.

Una característica importante de la variable aleatoria x_c también es la desviación δ_i de los valores de x_i respecto al valor medio:

$$\delta_i = x_i - x_c(\mathcal{N}). \quad (2)$$

Las propias desviaciones δ_i varían de un experimento a otro y por eso debemos elegir la variable que caracterice sus propiedades "por término medio". En calidad de tal variable no se puede elegir la media aritmética, ya que en el límite $Q \to \infty$ la misma tiende a cero. Efectivamente,

$$\frac{\delta_1 + \delta_2 + \ldots + \delta_Q}{Q} = \frac{x_1 + x_2 + \ldots + x_Q}{Q} - x_c(\mathcal{N}).$$

Pero cuanto mayor sea el valor de Q, tanto menos se distinguirá el primer término que integra el segundo miembro de dicha igualdad, de su segundo término, lo cual precisamente demuestra la afirmación aducida. Tal resultado está relacionado con el hecho de

que las desviaciones del valor medio ocurren obligatoriamente tanto hacia uno como hacia otro lado y por término medio se compensan recíprocamente.

Podríamos elegir la media aritmética de la variable no negativa $|\delta_i|$, sin embargo, el procedimiento generalmente admitido consiste en el cálculo de la *varianza* $\delta^2(\mathcal{N})$ que es la media aritmética de los *cuadrados* de las desviaciones (cuando $Q \to \infty$), los cuales, naturalmente, también son números no negativos:

$$\delta^2(\mathcal{N}) = \frac{\delta_1^2 + \delta_2^2 + \ldots + \delta_Q^2}{Q}. \tag{3}$$

La variable $\delta(\mathcal{N}) = [\delta^2(\mathcal{N})]^{1/2}$ se denomina *desviación cuadrática media* de la variable aleatoria. Ésta precisamente caracteriza la desviación típica de las variables x_i respecto a su valor medio $x_c(\mathcal{N})$. Es natural que la variable $\delta(\mathcal{N})$ también depende del número total de nudos de la rejilla $\mathcal{N}$.

Hablando con rigor, x_c es una variable aleatoria discreta, ya que resulta de dividir el número de nudos no bloqueados, entre la cantidad total de nudos $\mathcal{N}$, y por eso la misma sólo concierne a los valores que se convierten en números enteros después de multiplicarlos por $\mathcal{N}$. Designemos por x_k los diversos valores posibles de la variable aleatoria x_c.

El valor medio de $x_c(\mathcal{N})$ puede ser expresado a través de las probabilidades $P(x_k)$ de que la variable aleatoria x_c adquiera el valor de x_k. Recordemos que en la fórmula (1) se suman todos los valores de x_i obtenidos como resultado de Q experimentos. Además, todos esos valores pueden encontrarse muchas veces. La fórmula (1) se puede escribir de la forma siguiente:

$$\bar{x}_Q = \frac{x_1 Q_1 + x_2 Q_2 + \ldots}{Q}, \tag{4}$$

donde se suman todos los valores *diferentes* de x_k que puede adoptar la variable x_c (¡ningún valor de x_k en esta suma se repite dos veces!). El número Q_k indica cuántas veces se ha encontrado el valor de x_k en la serie de Q experimentos.

La variable Q_k/Q es la frecuencia relativa de aparición del valor de x_k. Con valores muy grandes de Q, esa variable se convierte en la probabilidad $P(x_k)$. Por definición, con grandes valores de Q, el primer miembro de la fórmula (4) se transforma en $x_c(\mathcal{N})$. Por esta razón

$$x_c(\mathcal{N}) = x_1 P(x_1) + x_2 P(x_2) + \ldots, \tag{5}$$

es decir, el valor medio es igual a la suma de todos los valores que puede adoptar la variable aleatoria, multiplicados por su probabilidad. De modo análogo

$$\delta^2(\mathcal{N}) = (x_1 - x_c(\mathcal{N}))^2 P(x_1) + $$
$$+ (x_2 - x_c(\mathcal{N}))^2 P(x_2) + \ \ldots \qquad (6)$$

En las fórmulas (5) y (6) se suman todos los valores posibles que puede adoptar la variable aleatoria x_c, con la particularidad de que cada uno de ellos se encuentra sólo una vez en la suma.

Por definición, $Q_1 + Q_2 + \ \ldots = Q$, es decir, de la definición $P(x_k)$ se deduce

$$P(x_1) + P(x_2) + \ \ldots \ = 1. \qquad (7)$$

La suma de probabilidades de todos los valores que puede adoptar la variable aleatoria es igual a la unidad.

¿PARA QUÉ SE NECESITA UNA REJILLA GRANDE?

En el problema del pequeño cubo "honesto" fue muy fácil calcular la probabilidad de que la variable aleatoria adopta uno u otro valor. Sin embargo, las propiedades de la variable aleatoria x_c son mucho más complicadas.

Al final del capítulo siguiente se muestra cómo se resuelve el problema respecto a una rejilla en forma de cuadrado de 2×2 nudos ($\mathcal{N} = 4$). El resultado consiste en que la variable aleatoria x_c sólo puede adoptar dos valores: $^1/_2$ y $^1/_4$. Adoptando el primer valor con la probabilidad $P(^1/_2) = {}^2/_3$, el segundo lo adopta con la probabilidad $P(^1/_4) = {}^1/_3$. Con arreglo a las fórmulas (5) y (6) (donde las sumas sólo incluirán dos términos), $x_c(4) = {}^5/_{12}$, y $\delta(4) = = \sqrt{2}/12$.

Armándose de paciencia, también es posible resolver el problema de 3×3 nudos ($\mathcal{N} = 9$). La experiencia demuestra que los esfuerzos necesarios crecen extraordinariamente al aumentar el lado del cuadrado incluso en un nudo. No obstante, representan interés principalmente las propiedades de las rejillas que contienen gran número de nudos (por ejemplo, 10^{15}). Tales rejillas pueden servir de modelo de películas integradas por átomos. Efectivamente, por regla general, la distancia entre los átomos en las sustancias condensadas (líquidos y cristales) es del orden de $3 \cdot 10^{-8}$ cm. Por eso una película de 1 cm^2 del área es tan fina que

los átomos ocupan solamente una capa, es decir, consta de 10^{15} átomos aproximadamente.

El problema acerca de la determinación de la probabilidad de que el umbral de percolación de una rejilla de un número muy grande de nudos $\mathcal{N}$ adopte uno u otro valor, es el problema central de la teoría de percolación. En mayor o menor medida, ese problema se examina en casi todo el libro. Ahora señalemos, prácticamente sin demostración, la propiedad más importante del referido problema, que es la clave para comprenderlo en general:

> La desviación cuadrática media $\delta(\mathcal{N})$ disminuye con arreglo a la ley exponencial al crecer el número $\mathcal{N}$ de nudos, tendiendo a cero cuando $\mathcal{N} \to \infty$.

Esta propiedad se expresa mediante la fórmula

$$\delta(\mathcal{N}) = \frac{C}{\mathcal{N}^{1/2\nu}}, \qquad (8)$$

donde $C \approx 0{,}54$ y $\nu \approx 1{,}3$. (La magnitud ν llámase *índice del radio de correlación*. La misma se examina detalladamente en la tercera parte del libro.)

La fórmula (8) no puede ser el resultado del experimento de B.P. Watson y P.L. Leath. Para obtenerla fue necesario utilizar rejillas de diversos valores de $\mathcal{N}$ y realizar muchos experimentos con un solo $\mathcal{N}$. Además, la fórmula (8) es el resultado de las investigaciones teóricas que se analizan en la tercera parte del libro.

De la fórmula (8) se deduce que cuanto más nudos contenga la rejilla, tanto menos diferirán entre sí los resultados de los experimentos que utilizan diversas sucesiones arbitrarias de los nudos bloqueados.

¿Por qué es asi? El hecho consiste en que en una rejilla bastante grande se encuentran numerosas configuraciones de nudos enteros bloqueados. En diversos experimentos, tales nudos parece como si cambiaran de lugar. Por eso, cuanto mayor sea $\mathcal{N}$, tanto menor importancia tendrá la casualidad. Una rejilla infinita contiene una cantidad infinita de rejillas grandes, por lo cual, para ella la casualidad no desempeña ningún papel en general, *y la variable* x_c *no es aleatoria, sino cierta, y equivale a*

$$x_c = \lim_{\mathcal{N} \to \infty} x_c(\mathcal{N}).$$

Precisamente esta variable límite se denomina, en efecto, umbral de percolación. Y precisamente para ella realizaron el experimento B. P. Watson y P. L. Leath. De lo contrario ¿para qué era necesario utilizar una rejilla que contuviera casi 19 000 nudos? ¡Podían haber usado una de 2×2!

Enunciemos ahora el resultado más importante de este capítulo:

En un sistema infinito es justa la noción de umbral de percolación estrictamente determinado, que no depende de la sucesión arbitraria de los nudos bloqueados, utilizada en el experimento. En un sistema finito no existe un umbral estrictamente determinado, sino que hay el llamado campo crítico cuyo ancho es del orden de $\delta(\mathcal{N})$ y en el que figuran los valores de x_c obtenidos en la mayoría de los experimentos con diversas sucesiones arbitrarias. Con el aumento de las dimensiones del sistema, ese campo se reduce a un punto.

Sin embargo es preciso tener en cuenta que la dependencia del tamaño del sistema sólo es importante si tratamos de simular artificialmente el fenómeno (por ejemplo, mediante una rejilla pantalla). Por lo general, la teoría de percolación se aplica a los sistemas cuyos elementos integrantes poseen dimensiones muy pequeñas. (Por ejemplo, esos elementos pueden ser átomos (véase el capítulo 3). Como ya fue dicho, ¡1 cm^2 de capa monoatómica contiene $\mathcal{N} = 10^{15}$ elementos, y 1 cm^3, $\mathcal{N} = 10^{22}$ elementos! Tal sistema puede ser considerado, con gran precisión, como infinito, sin prestar atención a la imprecisión del umbral de percolación, relacionada con su tamaño.)

El problema que resolvían B. P. Watson y P. L. Leath se denomina *problema de los nudos* (debido a que precisamente estos últimos son los elementos aleatorios). A él se reduce una serie de problemas científicos, uno de los cuales (sustancia ferromagnética con impurezas) se examina en el capítulo 3.

Aún se desconoce el valor preciso del umbral de percolación para este problema. La magnitud $x_c(\mathcal{N})$ se determina con grandes valores de $\mathcal{N}$, utilizando un ordenador o mediante los llamados experimentos análogos parecidos al experimento de B. P. Watson y P. L. Leath. (Su técnica puede ser muy variada.)

Según el cambio de $x_c(\mathcal{N})$ al variar $\mathcal{N}$, se puede apreciar en cuánto se asemeja el resultado obtenido al valor límite buscado. La comparación de los resultados obtenidos a base de procedimientos diferentes permite suponer que el número 0,59, según su escritura exacta (dos signos después de la coma), es preciso (aunque de antemano no se sabe si el número de nudos $\mathcal{N} = 137^2$ es suficiente

para eso), pero, por supuesto, que x_c puede precisarse infinitamente a expensas de los signos situados después de la coma. (Véase el ejercicio 5).

EJERCICIOS

1. Determinemos la variable aleatoria discreta a como el número de la cara de un cubo hexaédrico, la cual quedó dirigida hacia arriba después de lanzar el cubo. Hallar el valor medio de la variable a.

2. Definamos el umbral de percolación como el valor de x con el cual surge la percolación de arriba abajo, pero no de izquierda a derecha. ¿Variarán en este caso los resultados de los experimentos, $x_c(\mathcal{N})$ y x_c? Considerar que la rejilla es cuadrada.

3. Esa misma pregunta pero a condición de que por umbral de percolación ha sido elegido el valor mínimo de x con el que existe percolación tanto de izquierda a derecha como de arriba abajo.

4. Esa misma pregunta pero a condición de que por umbral de percolación ha sido elegido el valor máximo de x con el que no se observa percolación tanto de izquierda a derecha como de arriba abajo.

5. Valiéndose de la fórmula (8) calcular la desviación cuadrática media que corresponde a las condiciones del experimento de B. P. Watson y P. L. Leath ($\mathcal{N} = 137^2$). ¿Con qué precisión se puede contar si sólo se ha realizado un experimento?

Indicación: En principio, el resultado de un experimento puede diferenciarse mucho del valor medio de $x_c(\mathcal{N})$. Pero utilizando la función de distribución de los umbrales de percolación, expuesta más abajo (fórmula (6) del capítulo 2), se puede demostrar: la probabilidad de que el resultado del experimento arbitrariamente elegido se encuentre en el intervalo desde $x_c(\mathcal{N}) - \delta$ hasta $x_c(\mathcal{N}) + \delta$, equivale a 0,7 aproximadamente. Cuanto mayor sea $\mathcal{N}$, menor será δ y tanto más pequeña será la "desviación típica" del valor medio.

Capítulo 2 **

REGLAS FUNDAMENTALES DE CÁLCULO DE LAS PROBABILIDADES Y VARIABLES ALEATORIAS CONTINUAS

En este libro, dedicado a las regularidades de la ley del desorden, los conceptos de probabilidades y variables aleatorias se utilizan con amplitud. Parcialmente, los mismos ya fueron

introducidos en el capítulo anterior, así que el lector que no tenga deseo de estudiar a fondo el sentido matemático del problema, puede limitarse a la asimilación de los referidos conceptos, omitiendo tanto el capítulo 2 como todos los demás capítulos y apartados marcados con dos asteriscos. Pero quienes quieran seguir la resolución de una serie de interesantes problemas matemáticos expuestos en el libro, y tener una idea más profunda en cuanto a la teoría de percolación, deben conocer las reglas de adición y multiplicación de las probabilidades examinadas en este capítulo.

ACONTECIMIENTOS Y SUS PROBABILIDADES

El concepto de probabilidad se utiliza no sólo cuando se trata de valores numéricos adoptados por una variable aleatoria. Pueden examinarse cualesquier experimentos que proporcionaron resultados aleatorios. Los diversos resultados de los experimentos se denominan *acontecimientos* o *sucesos*. *Llámase frecuencia relativa de aparición de un acontecimiento la relación entre el número de experimentos que condujeron a dicho acontecimiento, y el número total de experimentos. El límite hacia el cual tiende la frecuencia relativa de aparición de un acontecimiento al aumentar infinitamente el número de experimentos, se denomina probabilidad del acontecimiento.*

Ejemplo. En un cajón colocaron igual número de bolas rojas, verdes y azules. Luego las mezclaron y sacaron al azar una de ellas. ¿Cuál es la probabilidad del acontecimiento que consiste en que la bola sacada sea roja? A diferencia del experimento con el cubo, en este caso los acontecimientos se distinguen no cuantitativa, sino cualitativamente (por el color de la bola). Pero debemos razonar con arreglo al mismo esquema. Como el número de bolas de cada tres colores es igual, la bola roja será sacada en un tercio de todos los experimentos. Por eso la probabilidad buscada constituye $^1/_3$. Las probabilidades de sacar una bola azul y una verde también equivalen a $^1/_3$.

Según la difinición, la probabilidad es una magnitud que varía de cero a la unidad. Por ejemplo, el acontecimiento que consiste en sacar una bola azul de un cajón en el que sólo hay bolas *rojas*, posee probabilidad nula. Sin embargo, la probabilidad de sacar de ese mismo cajón una bola roja, es igual a la unidad. El acontecimiento cuya probabilidad equivale a la unidad, ya no se denomina acontecimiento aleatorio, sino que acontecimiento *cierto*.

El concepto de probabilidad desempeña un papel muy importante al aclarar las regularidades del mundo de los procesos aleatorios. A menudo la regularidad resulta realmente enterrada bajo la casualidad. Imagínese que, según la información proporcionada por una casa de maternidad, Ud. trata de establecer las regularidades de nacimiento de varones y de hembras. Ante Ud. se halla una sucesión arbitraria del tipo VHVVVVHVHH ... A veces le parece que los varones nacen más a menudo, y a veces, al revés. Su amigo le asegura que "ahora sólo nacen hembras". Esa afirmación puede estar relacionada con el hecho de que nacieron hembras en tres familias que él conoce.

No obstante, existe cierta regularidad. La probabilidad de nacimiento de un varón corresponde a la probabilidad de nacimiento de una hembra, como 51,5 a 48,5. En países tan grandes como la URSS y los EE.UU., dicha regularidad se cumple bastante bien, incluso si se examinan los datos de un solo año.

A diferencia del problema de las bolas de varios colores, la resolución teórica del problema de nacimiento de hembras y varones es mucho más complejo. Sin embargo, los datos estadísticos aquí expuestos reflejan las propiedades absolutamente determinadas y bien estudiadas de la fisiología humana.

ADICIÓN DE LAS PROBABILIDADES

Los acontecimientos se denominan *incompatibles* si no pueden ser observados en un mismo experimento. Por ejemplo, el acontecimiento que consiste en que se ha sacado una bola roja, es incompatible con el acontecimiento que consiste en que se ha sacado una bola azul, ya que, según las condiciones del problema, en un mismo experimento sólo se puede sacar una bola: roja, azul o verde. También son incompatibles los acontecimientos que consisten en que un lanzamiento del cubo proporcione el número 5 y el 2.

Demostremos dos importantes propiedades de las probabilidades.

1. REGLA DE ADICIÓN. *La probabilidad de que suceda un acontecimiento cualquiera (es lo mismo cuál), entre varios acontecimientos incompatibles, equivale a la suma de las probabilidades de tales acontecimientos.* Supongamos que es necesario hallar la probabilidad de que el lanzamiento del cubo proporcione el número 3 o el 4. El número de experimentos en los que surgieron los valores que nos interesan, es igual a la suma del número de experimentos que proporcionaron el valor 3 más el número de experimentos que proporcionaron el valor 4. Por definición, para

hallar la probabilidad buscada hay que dividir esa suma entre el número total de experimentos Q y pasar al límite cuando $Q \to \infty$. Puesto que el límite de cada término de la suma, dividido entre Q, es igual a la probabilidad de obtener uno de los números que nos interesan, la probabilidad buscada equivale realmente a la suma de las probabilidades de obtención de cada uno de los números. Por consiguiente, la probabilidad de que aparezca un 3 o un 4 equivale a $^1/_6 + {^1/_6} = {^1/_3}$. La probabilidad de que aparezca un 1, o un 2, o un 3, o un 4 es igual a $^1/_6 + {^1/_6} + {^1/_6} + {^1/_6} = {^2/_3}$. Pero la probabilidad de que aparezca un 1, o un 2, o un 3, o un 4, o un 5, o un 6 equivale a $^1/_6 + {^1/_6} + {^1/_6} + {^1/_6} + {^1/_6} + {^1/_6} = 1$. Este resultado es un caso particular de la segunda propiedad.

2. *Llamaremos sistema completo de acontecimientos el conjunto de acontecimientos incompatibles que agota los posibles resultados de un experimento dado.* Por ejemplo, en el experimento del cubo, al sistema completo de acontecimientos pertenecen los acontecimientos que consisten en el hecho de que serán obtenidos los números 1, 2, 3, 4, 5 y 6. La segunda propiedad consiste en lo siguiente:

La suma de probabilidades de los acontecimientos que forman un sistema completo es igual a la unidad. De acuerdo con la primera propiedad, esta suma equivale a la probabilidad de que suceda cualesquiera de los acontecimientos que forman el sistema completo. Pero según la difinición de sistema completo, uno de esos acontecimientos ocurrirá obligatoriamente. (En el ejemplo del cubo esto significa que cualquier número de los seis posibles aparecerá obligatoriamente.) El acontecimiento que sucede sin falta es cierto y su probabilidad equivale a la unidad. Eso es precisamente lo que demuestra la segunda propiedad. (En el caso del cubo, tal acontecimiento estipula que la suma de probabilidades de los seis valores posibles es igual a la unidad.)

Con arreglo a las probabilidades de diversos valores que puede adoptar cualquier variable aleatoria, dicha propiedad fue enunciada en forma de fórmula (7) en el capítulo 1.

En ciertos casos la estipulación respecto a la incompatibilidad de los acontecimientos puede ser considerable al aplicar la regla de adición de las probabilidades. Examinemos el siguiente ejemplo.

Ejemplo. Cinco tiradores disparan al blanco simultáneamente. La calificación de los tiradores es igual: cada uno de ellos bate el blanco con una probabilidad de $^1/_3$. ¿Cuál es la probabilidad de que por lo menos uno de los tiradores dé en el blanco?

Es necesario hallar la probabilidad de que suceda uno de los cinco acontecimientos (es lo mismo cuál): que dé en el blanco el

primer tirador, el segundo, etc. Surge la idea de aplicar la regla de adición de las probabilidades. Conforme a esta regla, la probabilidad de que uno de los tiradores dé en el blanco equivale a la suma de las probabilidades:

$$P = {}^1/_3 + {}^1/_3 + {}^1/_3 + {}^1/_3 + {}^1/_3 = {}^5/_3.$$

Hemos obtenido un resultado evidentemente absurdo. La probabilidad resultó mayor que la unidad, lo cual no tiene absolutamente sentido. ¿Dónde está, pues, el error? Recordemos que la regla de adición se enuncia solamente para los acontecimientos incompatibles. ¿Y acaso no pueden dar en el blanco varios tiradores a la vez? Claro que sí. Eso es un ejemplo típico de acontecimiento compatible. Precisamente por ello no se puede aplicar la regla de adición.

Para resolver el problema de los tiradores es preciso aplicar la regla de multiplicación de las probabilidades, la cual será enunciada en el siguiente apartado.

MULTIPLICACIÓN DE LAS PROBABILIDADES

De nuevo lanzamos un cubo (dado) hexaédrico. La pregunta a que ahora debemos responder consiste en lo siguiente. Lanzamos el cubo dos veces seguidas y obtenemos dos números. ¿Cuál es la probabilidad de que esos dos números sean 6 y 4, además, que aparezcan precisamente en dicha sucesión: primero 6 y después 4?

El esquema de resolución es ordinario. Se realizan Q experimentos (cada uno de dos lanzamientos) y se determina el número de experimentos que dieron el resultado requerido. Al principio elijamos los experimentos en los que el primer lanzamiento dio 6, y el segundo, no importa qué. Ya conocemos este problema. En vista de que todas las caras del cubo son iguales, al realizar el primer lanzamiento, el número 6 (al igual que cualquier otro número de 1 a 6) apareció en una sexta parte de los experimentos, es decir, en la primera etapa hemos elegido $Q_1 = Q/6$ experimentos. (Se tiene en cuenta que el número Q es muy grande, por eso las desviaciones aleatorias del valor de Q_1 son pequeñas.) Ahora es necesario elegir los experimentos en los que el segundo lanzamiento proporcionó el número 4. En el segundo lanzamiento, la aparición de todos los números también es equiprobable. Por eso el número 4 apareció en una sexta parte de los experimentos. Así, la cantidad de experimentos en los que después del número 6 apareció el 4, es igual a $Q_2 = {}^1/_6 \cdot {}^1/_6 \cdot Q$.

mientras que la probabilidad de tal acontecimiento constituye

$$Q_2/Q = {}^1/_6 \cdot {}^1/_6 = {}^1/_{36}.$$

Compliquemos el problema. Supongamos que el experimento consta de tres lanzamientos y hay que buscar la probabilidad de que el referido experimento ha dado tres números en una sucesión determinada, por ejemplo, 4, 5 y 1 o bien 6, 6 y 6. Razonando de tal manera hallaremos que el número de experimentos que proporcionan el resultado buscado constituye $Q_3 = {}^1/_6 Q_2 = {}^1/_6 \cdot {}^1/_6 \cdot {}^1/_6 Q$, mientras que la probabilidad de tal resultado es $Q_3/Q = {}^1/_6 \cdot {}^1/_6 \cdot {}^1/_6 = {}^1/_{216}$.

Examinemos un ejemplo más. Supongamos que de cada diez mil bicicletas producidas por una fábrica, una bicicleta tiene defectos en el casquillo delantero, y dos bicicletas, en el casquillo trasero. Es decir, la probabilidad de que la bicicleta elegida al azar tenga defectos en el casquillo delantero constituye 1/10000, y en el trasero, 2/10000. Supongamos que los casquillos delanteros y traseros se fabrican en distintos talleres y la presencia de defectos en uno de ellos no aumenta y no disminuye la probabilidad del defecto de otro. Es necesario hallar la probabilidad de que la bicicleta elegida al azar tanga defectos en ambos casquillos. Debemos razonar igual que en los casos anteriores. Entre Q bicicletas elijamos las que tienen defectos en el casquillo delantero. Su número constituye $Q/10000$. De éstas elijamos las que también tienen defectos en el casquillo trasero. Obtendremos $(Q/10000) \cdot (2/10000)$. La probabilidad buscada es igual a $(1/10000) \cdot (2/10000) = 2 \cdot 10^{-8}$.

En ambos ejemplos fueron dadas las probabilidades de varios acontecimientos y era necesario hallar la probabilidad de que esos acontecimientos surgieran *conjuntamente*, es decir, en un mismo experimento. Los resultados obtenidos pueden ser enunciados en forma general.

La probabilidad de que surjan a la vez varios acontecimientos es igual al producto de las probabilidades de esos acontecimientos.

Esta regla requiere un complemento importante. En todos los ejemplos figuraban acontecimientos *independientes.* Dos acontecimientos se llaman independientes *si la realización de uno de ellos no se refleja en la probabilidad de realización del otro.* Por ejemplo, el hecho de que en el primer lanzamiento del cubo apareció el número 6, no se refleja de ningún modo en la probabilidad de que en el segundo lanzamiento aparezca el número 4; la existencia de defectos en el casquillo delantero no se refleja en la probabilidad de que también sea defectuoso el casquillo trasero.

Es fácil entender que la independencia de los acontecimientos es muy importante para deducir la regla de multiplicación de las probabilidades.

Examinemos otra vez el ejemplo de las bicicletas y supongamos que la independencia de los acontecimientos ha sido alterada del siguiente modo. Los casquillos delanteros y traseros de cada bicicleta se arman simultáneamente, pero la probabilidad de que se provoquen defectos en ciertos días es mayor que en otros. En este caso la presencia de defectos en uno de los casquillos aumenta la probabilidad de que se manifiesten defectos en otro casquillo, ya que también aumenta la probabilidad de que dicha bicicleta se haya fabricado en días desafortunados. Por esta razón crece la probabilidad de que ambos casquillos sean defectuosos.

Para comprender eso mejor, examinemos un caso extremo: supongamos que *todos* los defectos se provocan en días determinados. Todas las bicicletas fabricadas en esos días tienen defectos en el casquillo trasero, además, la mitad de dichas bicicletas también tienen defectos en el casquillo delantero. Entonces, la probabilidad de que la bicicleta elegida al azar (entre las bicicletas fabricadas en un año) tenga defectos en ambos casquillos, equivale a la probabilidad de que sea defectuoso el casquillo delantero, es decir, constituye 1/10000, y de ningún modo $2 \cdot 10^{-8}$. Así pues, la regla de multiplicación de las probabilidades sólo es justa para acontecimientos independientes.

La regla de multiplicación permite resolver con facilidad el problema de los cinco tiradores enunciado en el apartado anterior. Recordemos la condición: cinco tiradores disparan al blanco simultáneamente, y la probabilidad de dar en él constituye $^1/_3$ para cada uno de los tiradores. Hallar la probabilidad de que dé en el blanco por lo menos uno de ellos.

El procedimiento más fácil para resolver este problema es hallar la probabilidad de que ninguno de los tiradores dé en el blanco (designemos esa probabilidad por P_0). Como los impactos en el blanco proporcionados por distintos tiradores han de considerarse como acontecimientos independientes, la probabilidad P_0 es igual al producto de las probabilidades de que no dé en el blanco ninguno de los tiradores. El acontecimiento que consiste en que cierto tirador dé en el blanco, y el acontecimiento que consiste en que ese tirador no dé en el blanco, constituyen un sistema completo de acontecimientos. La suma de las probabilidades de esos dos acontecimientos es igual a la unidad. Si la probabilidad de que el tirador dé en el blanco es igual a $^1/_3$, la probabilidad de que él no dé en el blanco equivale a $1 - {}^1/_3 = {}^2/_3$.

Por lo tanto, la probabilidad de que los cinco tiradores no den en el blanco constituye

$$P_0 = {}^2/_3 \cdot {}^2/_3 \cdot {}^2/_3 \cdot {}^2/_3 \cdot {}^2/_3 = ({}^2/_3)^5.$$

El acontecimiento que consiste en que ninguno de los tiradores dé en el blanco, y el acontecimiento que consiste en que dé en él por lo menos uno de los tiradores, constituyen un sistema completo de acontecimientos. Por eso la probabilidad buscada P satisface la ecuación

$$P + P_0 = 1,$$

de donde se deduce que

$$P = 1 - P_0 = 1 - ({}^2/_3)^5 \approx 0{,}87.$$

EJERCICIOS

1. En una rejilla que contiene $\mathcal{N}$ nudos están bloqueados $\mathcal{N}'$ nudos. ¿Cuál es la probabilidad de que el nudo elegido arbitrariamente resulte bloqueado? ¿No bloqueado?

2. Hallar la probabilidad de que tres lanzamientos del cubo (dado), realizados consecutivamente, den tres números, 1, 2 y 3, en cualquier sucesión. Den los números 1, 2 y 2 en cualquier sucesión.

3. El primer taller fabrica buenas piezas, con una probabilidad de 0,8, y el segundo, con una probabilidad de 0,9. Elijamos al azar 3 piezas del primer taller y 4 del segundo. Hallar la probabilidad de que las 7 piezas son buenas.

UMBRAL DE PERCOLACIÓN EN UNA REJILLA DE 2 × 2

Los datos de la teoría de las probabilidades, expuestos más arriba, son absolutamente suficientes para investigar el problema de percolación en una rejilla cuadrada integrada por 4 nudos ($\mathcal{N} = 4$).

La fig. 2 ilustra el experimento con una rejilla de 2 × 2. Los números de los cuatro nudos se han escrito en distintos papeles, los cuales fueron metidos en una gorra y mezclados. Supongamos que la primera vez se sacó el papel con el número *1* y resultó bloqueado el primer nudo (fig. 2, *b*). (El esquema de razonamientos y los resultados finales no cambian en absoluto si la primera vez resulta bloqueado un nudo con otro número. El hecho es que en las rejillas de cuatro nudos todos los nudos ocupan posiciones equitativas.) Si la segunda vez resulta bloqueado el nudo *2*, la corriente no cesará (fig. 2, *c*) – ésta fluirá por el conductor inferior.

Una vez bloqueado el tercer nudo (el *3* o el *4*), la corriente, por supuesto, cesará y será registrado el hecho de que la parte crítica de los nudos no bloaqueados es igual a $^1/_4$. Pero si la segunda vez resulta bloqueado el nudo 3 o el 4, la corriente cesará y la parte crítica constituirá $^1/_2$ (fig. 2, *d* y *e*). Así pues, el umbral de percolación x_c es una variable aleatoria discreta que adopta los valores de $^1/_4$ y $^1/_2$. Calculemos la probabilidad P de que dicha variable adopta cada uno de los referidos valores: $P(^1/_4)$ y $P(^1/_2)$.

Todo depende de qué nudo será bloqueado el segundo. Si es el nudo *2*, entonces $x_c = {}^1/_4$, y si es el nudo *3* o el *4*, entonces $x_c = {}^1/_2$. Por lo tanto, la probabilidad $P(^1/_4)$ es igual a la probabilidad de que el segundo nudo bloqueado sea el *2*, mientras que $P(^1/_2)$ equivale a la probabilidad de que el segundo nudo bloqueado resulte el *3* o el *4*. Después del bloqueo del nudo *1*, los tres nudos restantes tendrán igual probabilidad de ser bloqueados la siguiente vez. La suma de las tres probabilidades es igual a la unidad, puesto que esos tres acontecimientos forman un sistema completo. Por consiguiente, cada una de las probabilidades es igual a $^1/_3$.

Así pues, la probabilidad de que el siguiente nudo bloqueado sea el *2*, es igual a $^1/_3$. Pero si el nudo *2* es el siguiente, entonces $x_c = {}^1/_4$. Por lo tanto, la probabilidad de que $x_c = {}^1/_4$ constituye $^1/_3$, es decir, $P(^1/_4) = {}^1/_3$. Ahora hay que hallar la probabilidad de que la segunda vez será bloqueado el nudo *3* o el *4*. De acuerdo con

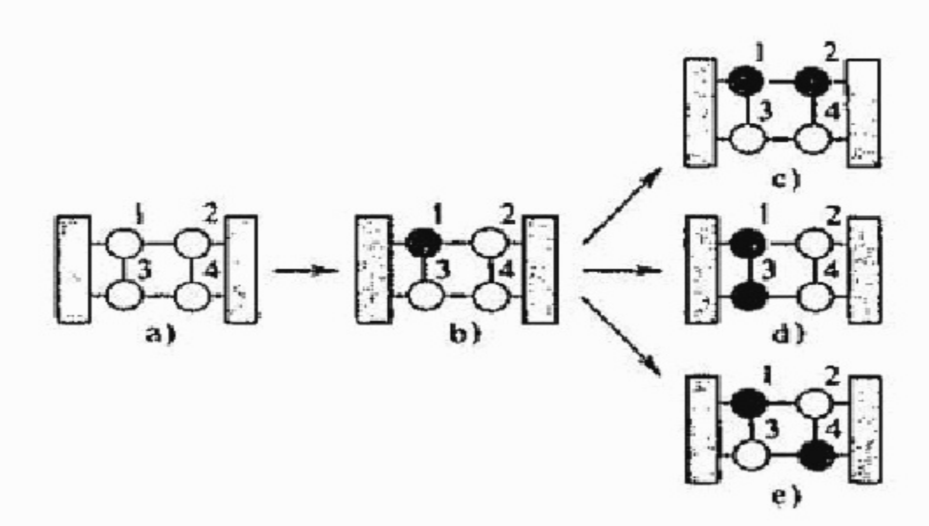


Fig. 2. Cálculo de la rejilla 2 × 2. *a*) Rejilla inicial; *b*) está bloqueado un solo nudo; *c*, *d*, *e*) están bloqueados dos nudos. En el caso *c* la corriente se interrumpe solamente después del bloqueo del tercer nudo, de esta manera $x_c = {}^1/_4$. En los casos *d* y *e* la corriente se interrumpe después del bloqueo del segundo nudo, así que $x_c = {}^1/_2$. Los tres casos *c*, *d* y *e* son equiprobables.

la regla de adición de las probabilidades, la referida probabilidad equivale a la suma de las probabilidades: $^1/_3 + ^1/_3 = ^2/_3$. Ésta es precisamente la probabilidad de que x_c adquiera el valor de $^1/_2$, por consiguiente, $P(^1/_2) = ^2/_3$. Como sólo son posibles dos valores de x_c, ha de cumplirse la igualdad $P(^1/_2) + P(^1/_4) = 1$. Efectivamente, $P(^1/_2) + P(^1/_4) = ^2/_3 + ^1/_3 = 1$.

Es fácil pronosticar el valor medio del umbral de percolación x_c (4). Conforme a la fórmula (5) del capítulo 1, $x_c\ (4) = {}^1/_2 \cdot P(^1/_2) + {}^1/_4 \cdot P(^1/_4) = {}^1/_2 \cdot {}^2/_3 + {}^1/_4 \cdot {}^1/_3 = {}^5/_{12}$. Este número difiere considerablemente del valor del umbral de $x_c = \lim\limits_{\mathcal{N} \to \infty} x_c(\mathcal{N})$ que, como ya se había dicho, es igual a $\approx 0{,}59$.

Es fácil calcular la varianza del umbral de percolación. Con arreglo a la fórmula (6) del capítulo 1,

$$\delta^2 (4) = (^1/_2 - {}^5/_{12})^2 \cdot {}^2/_3 +$$

$$(^1/_4 - {}^5/_{12})^2 \cdot {}^1/_3 = {}^1/_{72}.$$

La desviación cuadrática media

$$\delta (4) = \sqrt{2}/12.$$

EJERCICIO

4. Repitan los razonamientos suponiendo que la primera vez fue bloqueado el nudo 3.

VARIABLE ALEATORIA CONTINUA

Hasta ahora han sido examinadas las variables aleatorias discretas. Pero también existen variables aleatorias *continuas* que pueden adoptar cualquier valor en cierto segmento del eje numérico.

Supongamos que la variable aleatoria a puede adoptar todos los valores de y que se encuentran en el campo de A в B ($A \leqslant y \leqslant B$), teniendo en cuenta que ella adopta algunos valores a menudo, y otros, rara vez. Para describir esto matemáticamente, se introduce la función de distribución $f(y)$ de la variable aleatoria a.

La propiedad fundamental de la función de distribución consiste en lo siguiente: si los puntos A_1 y B_1 se encuentran dentro del intervalo (A, B), además, si $A_1 < B_1$, entonces *la probabilidad de que el valor de la variable aleatoria resulte en el intervalo* $A_1 \leqslant y \leqslant B_1$ *es igual a la superficie limitada por el gráfico de la función*

$f(y)$, el eje de abscisas y las perpendiculares levantadas en los puntos A_1 y B_1 (en la figura 3 esa superficie está sombreada). Quien conoce el cálculo integral comprenderá que dicha probabilidad (designémosla por $P(A_1, B_1)$) puede ser expresada por la fórmula

$$P(A_1, B_1) = \int_{A_1}^{B_1} f(y)\, dy.$$

Como todos los valores de la variable aleatoria se encuentran en el intervalo (A, B) y la misma adopta obligatoriamente alguno de ellos, la superficie buscada es igual a la unidad. Con otras palabras,

$$P(A, B) = \int_{A}^{B} f(y)\, dy = 1. \qquad (1)$$

A veces esta igualdad se denomina condición de normación de la función de distribución.

La figura cuya superficie se expresa por la integral (1), llámase trapecio curvilíneo (véase la figura 3). Si el intervalo (A_1, B_1) es tan pequeño que la función de distribución en su interior prácticamente no puede variar, el trapecio curvilíneo puede ser sustituido por un rectángulo con altura $f(y_1)$, donde y_1 es cualquier punto del intervalo (A_1, B_1). En este caso

$$P(A_1, B_1) = f(y_1)\,\Delta, \qquad (2)$$

donde $\Delta = B_1 - A_1$ es la anchura del intervalo (A_1, B_1).

En la literatura matemática, la función $f(y)$ se llama *densidad de probabilidad*. Como se deduce de la fórmula (2), con pequeña anchura del intervalo (¡sólo en este caso es aplicable dicha fórmula!), la probabilidad de que la variable aleatoria resulte dentro de él es directamente proporcional a la anchura del mismo. La

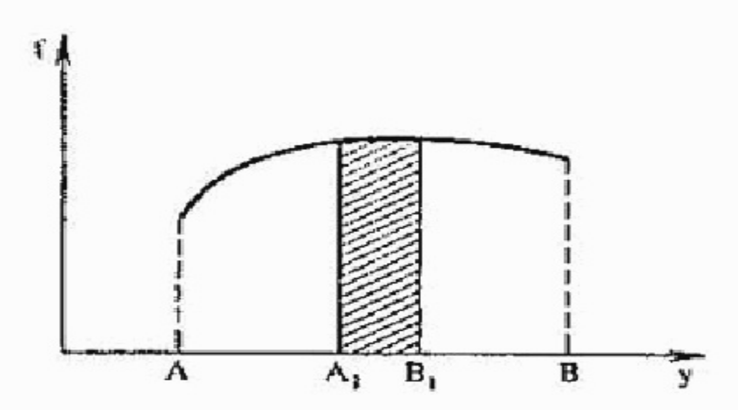


Fig. 3.

función $f(y)$ es la probabilidad dividida entre la anchura del intervalo, o bien la probabilidad correspondiente a la unidad de longitud de este último, o, con otras palabras, la densidad de probabilidad. Pero los físicos prefieren más el término "función de distribución".

Escribamos las fórmulas (5) y (6) del capítulo 1, para el valor medio y la varianza en el caso de una variable aleatoria continua, de la forma siguiente:

$$\bar{a} = \int_A^B y f(y)\, dy, \tag{3}$$

$$\delta^2 = \int_A^B (y - \bar{a})^2 f(y)\, dy, \tag{4}$$

donde $\bar{a}$ es el valor medio de la variable aleatoria a.

Daremos un ejemplo de función de distribución.

Distribución uniforme. La variable aleatoria continua adopta, con igual probabilidad, todos los valores desde cero hasta la unidad y no puede adoptar otros. Es evidente que la función $f(y)$ no dependa de y dentro del intervalo (0, 1), y que la misma sea igual a cero fuera de ese intervalo (fig. 4). Su valor dentro de este último se puede hallar fácilmente a partir de la condición de normación (1). En este caso $A = 0$, $B = 1$, y el trapecio curvilíneo se transforma en un rectángulo cuya superficie constituye $f_0 \cdot 1$, donde f_0 es el valor de la función dentro del intervalo, mientras que la anchura de éste es igual a 1. De la condición de normación se deduce que $f_0 \cdot 1 = 1$, es decir, $f_0 = 1$. Así pues,

$$f(y) = \begin{cases} 1 \text{ cuando } 0 \leqslant y \leqslant 1, \\ 0 \text{ UANO } y > 1 \text{ e } y < 0. \end{cases} \tag{5}$$

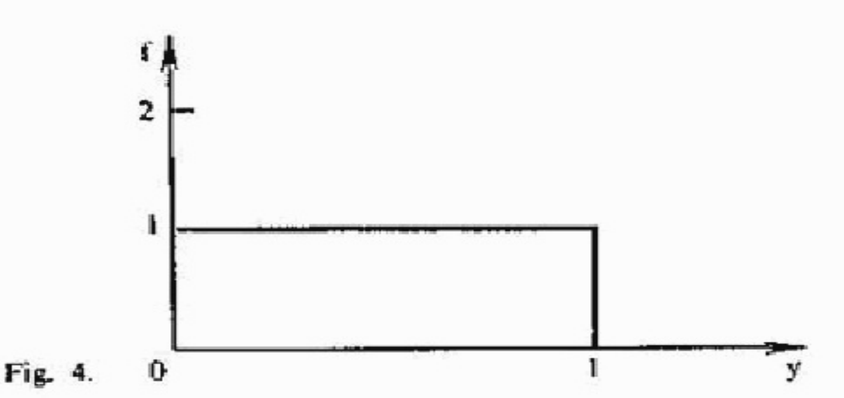


Fig. 4.

EJERCICIO

5. La variable aleatoria continua a adopta, con igual probabilidad, todos los valores desde -1 hasta $+1$. Hallar la probabilidad de que ella se encuentre en el intervalo de $-{}^{3}/_{4}$ a $-{}^{1}/_{4}$.

UMBRAL DE PERCOLACIÓN COMO VARIABLE ALEATORIA CONTINUA

Hablando en rigor, el umbral de percolación es una variable aleatoria discreta, ya que todos los valores que la misma puede adoptar se convierten en números enteros al ser multiplicados por el número total de nudos $\mathcal{N}$. Pero con grandes valores de $\mathcal{N}$, es muy pequeña la diferencia de los próximos valores posibles de dicha variable aleatoria (ésta es igual a $\mathcal{N}^{-1}$). Por eso en el caso más importante, cuando el número de nudos sea grande, el umbral de percolación x_c puede ser considerado, con buena exactutid, como una variable aleatoria continua que adopta todo género de valores situados dentro de cierto intervalo en el eje numérico. Entonces la variable x_c ha de ser caracterizada por la función de distribución $f(y)$. En este apartado se describe el aspecto que adquiere la función $f(y)$ con grandes valores de $\mathcal{N}$.

La función de distribución de los valores de umbral de x_c debe depender del número $\mathcal{N}$ de nudos de la rejilla utilizada en los experimentos. Por eso será más correcto designar por $f_{\mathcal{N}}(y)$ la función de distribución. Por variable y conviene entender no el propio valor de umbral, sino su desviación del valor medio de $x_c(\mathcal{N})$. Entonces $f_{\mathcal{N}}(y)\Delta$ será la probabilidad de que el valor de umbral, obtenido en cierto experimento, difiere del valor medio de $x_c(\mathcal{N})$ en una variable situada en el pequeño intervalo Δ cerca del valor de y. Según la definición, el valor medio, calculado con ayuda de la función $f_{\mathcal{N}}(y)$ y por medio de la fórmula (3), es igual a cero.

En la figura 5 está representada la función $f_{\mathcal{N}}(y)$ para tres valores distintos de $\mathcal{N}$. Como se deduce de la figura, con el aumento del número $\mathcal{N}$ de nudos, la función de distribución se hace cada vez más aguda. Eso significa que las desviaciones del valor medio (¡recordemos que éste se considera igual a cero!) se hacen cada vez menos probables con el aumento de $\mathcal{N}$. De acuerdo con la fórmula (1) del apartado anterior, las superficies debajo de las tres curvas en forma de campana deben ser iguales. Con el aumento de $\mathcal{N}$ crece la altura máxima de las curvas y disminuye su ancho. La anchura de la curva en forma de campana puede ser definida como la distancia entre los puntos de intersección de

dicha curva con la recta horizontal trazada a una distancia del eje de abscisas igual a la mitad de la altura máxima de esa curva (fig. 5). Designemos tal anchura por $\Delta_{\mathcal{N}}$, la cual suele llamarse semianchura.

Los valores del umbral de percolación situados fuera de la semianchura de la curva, tienen por lo menos una probabilidad dos veces menor que el valor más probable del umbral. Así pues, la semianchura caracteriza la dispersión típica de los umbrales de percolación, incluidas las desviaciones cuya probabilidad es dos veces menor que la probabilidad en el máximo de la curva $f_{\mathcal{N}}(y)$.

Recordemos que, en esencia, la desviación cuadrática media (cap. 1) contiene esa misma información. La misma no determina la desviación cuya probabilidad es justamente dos veces menor que la desviación máxima, sino que determina la dispersión típica de los valores de los umbrales de percolación.

Para cualquier curva en forma de campana, los valores de $\Delta_{\mathcal{N}}$ y $\delta_{\mathcal{N}}$ son proporcionales entre sí, pero el coeficiente de proporcionalidad depende del tipo de curva. Los cálculos realizados en ordenadores mostraron que la función de distribución de los umbrales de percolación es una función de Gauss (así llamada en honor al gran matemático C. Gauss). Dicha función tiene el siguiente aspecto:

$$f_{\mathcal{N}}(y) = \frac{1}{\delta_{\mathcal{N}}\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\delta_{\mathcal{N}}^2}\right), \qquad (6)$$

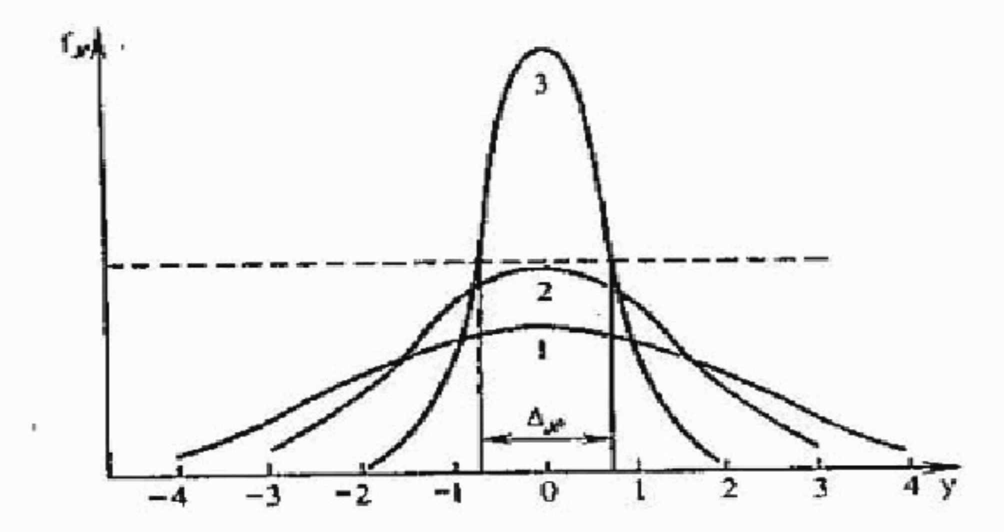


Fig. 5. Funciones $f_{\mathcal{N}}(y)$. El número de nudos $\mathcal{N}$ crece con el número de la curva. La línea de trazos indica la mitad de la altura de la curva 3, $\Delta_{\mathcal{N}}$ es la semianchura de esta curva.

donde $\exp a \equiv e^a$; $e \approx 2{,}72$ es la base del logaritmo natural, representada en la figura 5 para distintos valores de $\delta_{\mathcal{N}}$. Como la función es simétrica respecto al punto $y = 0$ en el que ella alcanza el valor máximo, la semianchura $\Delta_{\mathcal{N}}$ puede ser hallada de la siguiente relación (véase la fig. 5):

$$f_{\mathcal{N}}\left(\frac{\Delta_{\mathcal{N}}}{2}\right) = \frac{1}{2} f_{\mathcal{N}}(0).$$

Utilizando la fórmula (6) obtenemos

$$\Delta_{\mathcal{N}} = 2\,(2 \ln 2)^{1/2} \delta_{\mathcal{N}}.$$

Según la fórmula (8) del capitulo 1, el valor de $\delta_{\mathcal{N}}$ se reduce a cero con arreglo a la ley exponencial, si $\mathcal{N} \to \infty$. Eso significa que con el aumento ilimitado del número de nudos, la semianchura de la función de distribución de los umbrales de percolación tiende a cero, es decir, la propia función se convierte en un pico evidente. Todos los valores del umbral de percolación, excepto uno, tienen una probabilidad nula. En relación con esto, repetimos otra vez la afirmación fundamental del capítulo anterior: cuando $\mathcal{N} \to \infty$, el umbral de percolación, siendo una variable aleatoria, se trinsforma en una magnitud cierta.

EJERCICIO

6. (¡Para los que dominan el cálculo integral!) Sustituyan la función $f_{\mathcal{N}}(y)$ – que se determina mediante la fórmula (6) – en las fórmulas (3) y (4) y demuestren que el valor medio de $\tilde{a}$, calculado con ayuda de dicha función, es igual a cero, y que la varianza δ^2 constituye $\delta^2_{\mathcal{N}}$.

Capítulo 3
RACIMO INFINITO

En este capitulo de nuevo hablaremos del problema de los nudos de la teoria de percolación, pero esta vez ese problema será enunciado de otro modo – en el lenguaje de los racimos. Además será examinado otro objeto : en vez de la rejilla con nudos bloqueados, hablaremos de la sustancia ferromagnética con átomos de impureza. Es un objeto mucho más complicado, por eso conviene detenerse en él aunque sea brevemente.

3 413

IMÁN PERMANENTE

Seguramente que casi todos saben por qué el níquel, el cobalto y algunos otros materiales pueden ser imanes permanentes. Dicho fenómeno se explica por el hecho de que los átomos que integran tales sustancias son, de por sí, imanes elementales, es decir, poseen *momentos magnéticos.*

Un sistema bien conocido, dotado de momento magnético, es la aguja de la brújula. El momento magnético es un vector. La aguja de la brújula tiene polo sur y polo norte, y su momento magnético se halla dirigido del polo sur al polo norte. El campo magnético exterior provoca el giro de la aguja de la brújula hasta que la misma permanezca orientada a lo largo de las líneas magnéticas de fuerza. Así mismo gira en el campo exterior cualquier momento magnético. La aguja de la brújula genera un campo magnético exterior, y cualquier momento magnético genera otro campo magnético absolutamente igual.

Ya a principios del siglo XIX fue aclarado que el manantial de magnetismo es el movimiento de las cargas eléctricas, es decir, la corriente eléctrica. El momento magnético es generado por esta corriente. Para el contorno plano con corriente, representado en la figura 6, el momento magnético μ se determina mediante la fórmula $\mu = (1/c) IS$, donde I es la intensidad de corriente; S, la superficie del contorno, y c, la velocidad de la luz (en el sistema de unidades C. G. S.). El vector está dirigido perpendicularmente al plano del contorno, además, de tal modo que la corriente fluya de derecha a izquierda si miramos del lado hacia donde indica la flecha del vector.

Si el sistema se compone de varios contornos con corriente, entonces, utilizando la regla del paralelogramo, es posible sumar los momentos magnéticos de los contornos y hallar el momento magnético total del sistema.

¿Cómo surge el momento magnético en los átomos? Según es sabido, el átomo consta de un núcleo pesado y una capa

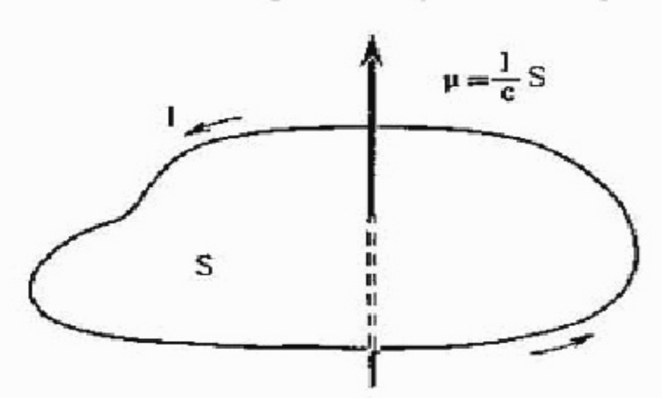


Fig. 6. Contorno con corriente y su momento magnético.

electrónica. El magnetismo de los cuerpos sólidos está relacionado precisamente con el momento de dicha capa (el núcleo del átomo también puede poseer momento magnético, pero aproximadamente mil veces menor que el momento de la capa).

El momento de ésta se halla relacionado, en primer lugar, con el movimiento de los electrones en torno al núcleo pesado. A ese movimiento puede oponerse cierta intensidad de corriente I y la superficie eficaz S. Además, la mecánica cuántica atribuye a cada electrón un momento magnético complementario denominado *spin*. Este último no está relacionado de ningún modo con el carácter del movimiento del electrón, sino que es su propiedad interior. Pero el momento de spin genera campo magnético al igual que un momento ordinario. Lo más a menudo el momento magnético sumario de las capas electrónicas de los átomos que constituyen el cuerpo sólido, es igual a cero. Sin embargo, las capas electrónicas de algunas sustancias, tales como el hierro, níquel, cobalto, etc., poseen momento magnético.

En los cuerpos sólidos, los momentos magnéticos de los átomos inmediatos interaccionan unos con otros. En principio, tal interacción se parece a la de las agujas de dos brújulas situadas una al lado de otra. Cada aguja engendra un campo magnético que actúa sobre la otra aguja. No obstante, el asunto se complica considerablemente debido a que la interacción no ocurre en el vacío. Las capas electrónicas exteriores de los átomos influyen mucho sobre el carácter de esa interacción, cambiando incluso las direcciones de las fuerzas activas.

El experimento muestra que en algunas sustancias, la interacción de los momentos magnéticos es tal que las fuerzas que actúan entre ellos, obligan a esas fuerzas a orientarse en una dirección. Tales sustancias se llaman ferromagnéticas (fig. 7).

Si los momentos magnéticos de todos los átomos permanecen orientados en una misma dirección, el momento magnético total $\mathcal{M}$ será igual a la suma aritmética de dichos momentos: $\mathcal{M} = \mu\mathcal{N}$,

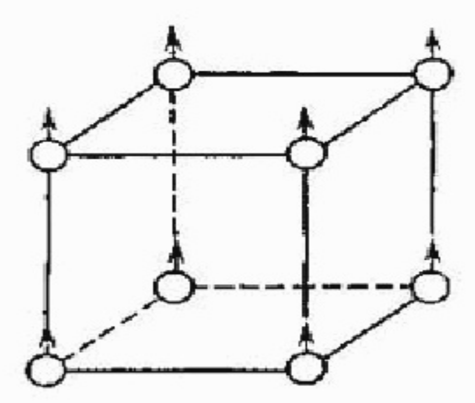


Fig. 7. Fragmento de la red cristalina de una sustancia ferromagnética. Con saetas se indican los sentidos de los momentos magnéticos.

donde $\mathcal{N}$ es el número de átomos en el cuerpo sólido, y μ, el momento magnético de un átomo.

Al aumentar el tamaño del cuerpo, el momento magnético crece proporcionalmente a su volumen (el número de átomos $\mathcal{N}$ es proporcional al volumen). La característica específica de las propiedades magnéticas, es decir, la magnitud que no depende del tamaño de los cuerpos y que sólo depende de las propiedades de los átomos que constituyen tales cuerpos, es la llamada *imantación espontánea M*. La misma se determina como el momento magnético de la unidad de volumen, o sea, equivale al momento total $\mathcal{M}$ dividido entre el volumen del cuerpo V:

$$M = \frac{\mathcal{M}}{V} = \mu \frac{\mathcal{N}}{V} = \frac{\mu}{v_0},$$

donde $v_0 = v/\mathcal{N}$ es el volumen correspondiente a un átomo.

La palabra *espontánea* significa que la imantación M surge no a causa de la acción del campo magnético exterior, sino a expensas de las fuerzas internas. Un imán permanente es precisamente el cuerpo en cuyo seno la imantación espontánea difiere de cero. Gracias a la imantación, en el medio circundante al imán (o en el vacío) se genera un campo magnético.

La imantación espontánea, en el sistema de unidades C. G. S., se mide en gaussios. Por ejemplo, en el hierro, a temperaturas muy bajas, $M = 1740$ Gs. De aquí se puede hallar el momento magnético μ correspondiente a un átomo. Este momento constituye aproximadamente 2,2 del momento magnético de spin del electrón. El hecho de que el momento μ sea del orden del momento de spin confirma la exactitud de nuestras nociones acerca de la naturaleza de la imantación espontánea.

El movimiento térmico destruye el orden magnético, y por eso existe una temperatura crítica que se denomina punto de Curie, por encima de la cual la imantación espontánea es igual a cero. Por ejemplo, para el hierro, el punto de Curie constituye 770 °C[1]. A temperaturas más altas el hierro no puede ser imán permanente.

SUSTANCIA FERROMAGNÉTICA CON IMPUREZAS

Examinemos ahora una sustancia que constituye una solución (mezcla) sólida de átomos magnéticos y no magnéticos (desprovistos de momento magnético). Es un cristal en cuyos nudos se hallan dispuestos átomos magnéticos y no magnéticos,

[1] Para la comparación, el punto de Curie es de 360 °C para el níquel y 1100 °C para el cobalto.–(*Nota del traductor.*)

además, su disposición no es ordenada sino absolutamente arbitraria.

Supongamos que la interacción de los momentos magnéticos de los átomos disminuye en función de la distancia tan rápidamente que ha de tomarse en consideración solamente la interacción de los átomos más cercanos. Eso significa que si dos átomos magnéticos se encuentran juntos, sus momentos son paralelos obligatoriamente, pero si entre ellos hay aunque sea un átomo no magnético, sus momentos pueden tener direcciones arbitrarias: los mismos ya "no saben nada" uno del otro.

La cuestión que ahora será planteada consiste en si existirá imantación espontánea al haber átomos no magnéticos, y cuántos átomos de este tipo se necesitarán para destruir tal imantación. Más abajo se demuestra que la respuesta a esa cuestión se reduce a la resolución del problema de los nudos, enunciado en el capítulo 1.

Introduzcamos algunas definiciones. *Diremos que dos átomos magnéticos se hallan enlazados entre sí, en el caso de que permanezcan uno al lado del otro, o bien cuando estén unidos entre sí por medio de una cadena de átomos magnéticos situados uno al lado del otro* (fig. 8). La expresión "situados uno al lado del otro" significa que dichos átomos son los más cercanos. En el retículo cuadrado representado en la figura 8, los átomos más cercanos son los situados horizontal y verticalmente, pero no los dispuestos a lo largo de la diagonal. *El conjunto de átomos enlazados se denomina racimo o grupo.* El sentido de tal definición consiste en lo siguiente.

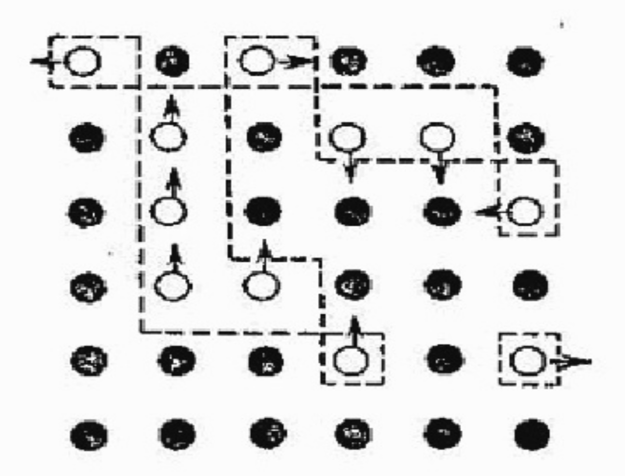


Fig. 8. Pedazo de retículo plano con átomos magnéticos (claros) y no magnéticos (oscuros). Los átomos magnéticos forman un racimo de cuatro átomos, un racimo de dos átomos y cinco racimos de un átomo. Los límites de los racimos se indican mediante líneas de trazos. Los momentos de los diversos racimos pueden ser dirigidos en sentidos diferentes.

Gracias a la interacción magnética, los átomos enlazados orientan sus momentos magnéticos en un solo sentido. Así pues, cada racimo posee un momento magnético resultante, el cual es proporcional al número de átomos que integran ese racimo. Además, hemos acordado que los átomos magnéticos que no son vecinos próximos no actúan recíprocamente. Por eso tampoco actuarán entre sí los átomos que pertenezcan a diversos racimos. Por consiguiente, la orientación recíproca de los momentos magnéticos que pertenecen a distintos racimos resulta arbitraria (fig. 8).

Designemos por x la porción de átomos magnéticos, es decir, la relación entre el número de esos átomos y el número total de nudos en el retículo. Según la definición, el valor de x varía en el intervalo de 0 a 1.

Al principio supongamos que hay muy pocos átomos magnéticos ($x \ll 1$). Es natural que en este caso ellos suelen situarse aisladamente (como las pasas en un panecillo). Un racimo de dos átomos magnéticos constituye un acontecimiento muy raro, pero aún más raro es el racimo de tres átomos, etc. Esta afirmación es muy importante para los razonamientos posteriores, y un poco más abajo la misma será demostrada matemáticamente. Pero por ahora, quienes no se hayan convencido del todo en su evidencia, que crean en ella "de buena fe".

Así pues, cuando $x \ll 1$, el número de racimos equivale aproximadamente al número de átomos magnéticos $\mathcal{N}$ y, por consiguiente, ese número crece cuando el número total de nudos aumenta proporcionalmente a $\mathcal{N}$. Pero los momentos magnéticos de dichos racimos "no saben nada" uno del otro y, por lo tanto, se hallan orientados caóticamente uno respecto a otro (fig. 8). Para obtener el momento magnético completo del sistema $\mathcal{M}$, es necesario sumar los momentos de cada átomo por separado, aplicando la regla del paralelogramo. Estos momentos, gracias a su dirección arbitraria, se compensan mutuamente de tal modo que la imantación espontánea resulta igual a cero. *Así, hemos establecido que con pequeñas concentraciones de átomos magnéticos no existe imantación espontánea.*

APARICIÓN DE UN RACIMO INFINITO

Ahora examinemos el caso cuando casi todos los átomos son magnéticos. Es evidente que una pequeña impureza de átomos no magnéticos no anula la imantación espontánea, sino que sólo tiende a reducirla. Analicemos esta cuestión en el lenguaje de los racimos. Cuando $x = 1$ todos $\mathcal{N}$ átomos pertenecen a un racimo.

Si x se distingue poco de la unidad, parte de los átomos desaparecen de dicho racimo. Eso sucede, en primer lugar, porque algunos de ellos son reemplazados por átomos no magnéticos (los átomos A en la figura 9) y, en segundo lugar, porque algunos átomos magnéticos forman racimos aislados (el átomo B en la figura 9) con su dirección del momento magnético. No obstante, con valores de x próximos a la unidad, se mantiene un racimo único que atraviesa toda la red por muy grande que sea. Este racimo suele llamarse *racimo infinito*.

Por supuesto que tal concepto adquiere sentido estricto solamente con arreglo al sistema infinito. Tomemos una serie grande de muestras con valores establecidos del número de átomos magnéticos y del número total de átomos, y elijamos en cada una de ellas un racimo con el máximo número de átomos magnéticos. Promediemos el número de éstos, pertenecientes al racimo máximo, utilizando todas las muestras de la serie, y designemos por $\mathcal{N}_{máx}$ el resultado de la promediación. Así pues, $\mathcal{N}_{máx}$ es el número medio de átomos en el racimo más grande. La variable $\mathcal{N}_{máx}$ depende de $\mathcal{N}$ y de x. La existencia de un racimo infinito se manifiesta en el hecho de que, con un valor establecido de x, la relación $\mathcal{N}_{máx}/\mathcal{N}$, al aumentar ilimitadamente $\mathcal{N}$, tiende a un límite diferente de cero:

$$\lim_{\mathcal{N}\to\infty} \frac{\mathcal{N}_{máx}}{\mathcal{N}} P(x).$$

La porción de átomos $P(x)$ pertenecientes al racimo más grande no depende del número de átomos $\mathcal{N}$ si este número es bastante

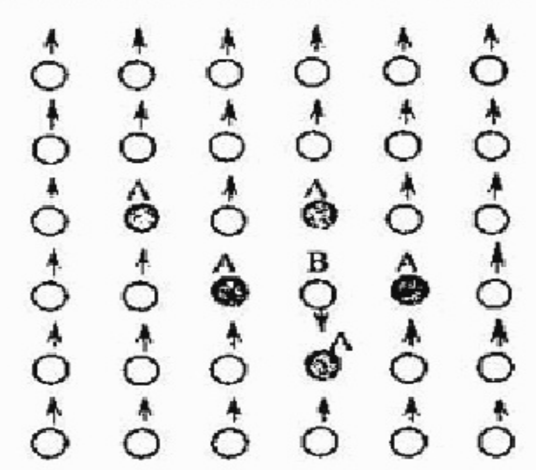


Fig. 9. Fragmento de una red plana con átomos magnéticos (claros) y no magnéticos (oscuros) en el caso de gran concentración de los primeros. Todos los átomos magnéticos, salvo el B, pertenecen a un racimo, y sus momentos magnéticos tienen igual dirección.

grande, pero depende de x. A su vez, el propio valor de $\mathcal{N}_{máx}$ tiende al infinito al aumentar infinitamente $\mathcal{N}$. Precisamente por eso se habla de la existencia de un racimo infinito.

En el sistema puede existir un solo racimo infinito. Supongamos que con valores establecidos de $\mathcal{N}$ y x, ha sido determinado no sólo el número medio de átomos en el racimo más grande, sino también el número medio de átomos en el siguiente racimo según su valor. Designemos este último valor por $\mathcal{N}'_{máx}$. Según la definición, $\mathcal{N}'_{máx} < \mathcal{N}_{máx}$. La afirmación de que en el sistema puede haber un solo racimo infinito, significa que

$$\lim_{\mathcal{N}\to\infty} \frac{\mathcal{N}'_{máx}}{\mathcal{N}} = 0$$

para todos los valores de x. A su vez, esto significa que los dos racimos que atravesaron todo el sistema, en cierto momento deben enlazarse inevitablemente uno con el otro, convirtiéndose en un solo racimo[1].

Así, hemos establecido que con bastante concentración de átomos magnéticos x, una parte determinada de ellos pertenece a un solo racimo, y sus momentos magnéticos tienen igual dirección. Esto significa que existe una imantación espontánea:

$$M = \frac{\mu}{v_0} P(x).$$

Recordemos ahora que con poca concentración de átomos magnéticos x, sólo existen racimos pequeños. En este caso, el aumento del número de nudos $\mathcal{N}$, solamente conduce al incremento del número de pequeños racimos, pero no al aumento del número de partículas en cada uno de esos racimos. Entonces $\lim_{\mathcal{N}\to\infty} \frac{\mathcal{N}_{máx}}{\mathcal{N}} = 0$, es decir, $P(x) = 0$. *Por lo tanto, llegamos a la conclusión de que existe una concentración crítica x_c con la que surge un racimo infinito, además, x_c satisface las desigualdades* $0 < x_c < 1$. Con esta misma concentración de x_c aparece la imantación espontánea y comienza a diferir de cero la función $P(x)$ (fig. 10).

---

[1] Hablando en rigor, la afirmación de que existe un solo racimo infinito no ha sido demostrada. Hay argumentos en su favor, de mayor o menor grado de certeza, pero es más correcto decir que los especialistas simplemente creen de buena fe en dicha afirmación.

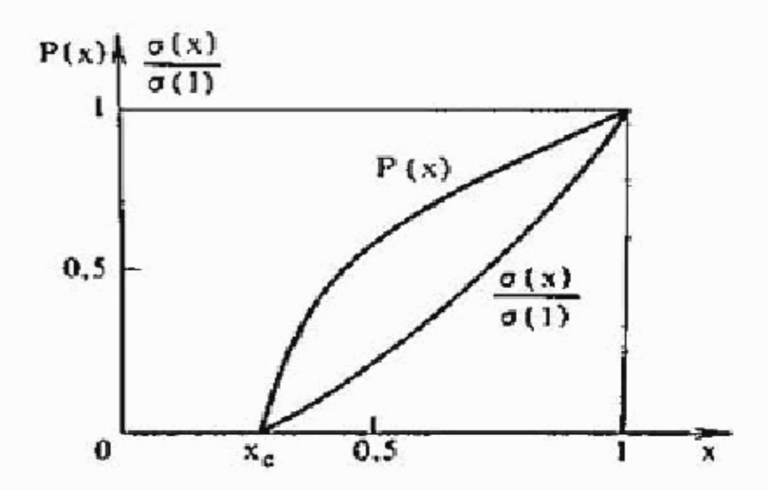


Fig. 10. Gráficos de las funciones $P(x)$ y $\sigma(x)/\sigma(1)$. Ambas se reducen a cero en un punto, pero debido a causas que serán aclaradas en la tercera parte del libro, la forma de estas funciones cerca del valor crítico x_c se diferencia considerablemente.

Por consiguiente, *si la porción de átomos no magnéticos resulta mayor de* $1 - x_c$ (la porción de átomos magnéticos es menor de x_c), *la sustancia no puede ser imán permanente.*

EJERCICIO

1. Hallar el aspecto de la función $P(x)$ para valores de x próximos a la unidad.

DE NUEVO EL PROBLEMA DE LOS NUDOS

Ahora sólo nos queda decir que desde el punto de vista de la concentración crítica x_c, el problema de la electroconductibilidad de una rejilla y el problema de la sustancia ferromagnética con impurezas constituyen un mismo problema.

El problema de la electroconductibilidad también puede ser enunciado con facilidad en el lenguaje de los racimos. Sólo es necesario sustituir en todas las definiciones el concepto de "átomo no magnético" por "nudo bloqueado".

La figura 8 ilustra cierta configuración de átomos magnéticos (círculos claros) y no magnéticos (círculos oscuros). Efectuemos para esta configuración la sustitución anteriormente indicada y pasemos de la sustancia ferromagnética con impurezas a una rejilla pantalla con nudos cortados. Para este fin hay que eliminar, en la figura 8, las flechas que indican las direcciones de los momentos magnéticos y representar los alambres que enlacen los nudos entre sí (fig. 11).

En la figura 11 se distingue muy bien la propiedad fundamental de los racimos, conforme al problema de la rejilla. *Si a cualquier par de nudos de un solo racimo le aplicamos la diferencia de potencial, surgirá un circuito cerrado por el cual fluirá corriente eléctrica.* (Claro está que dicha propiedad tiene sentido solamente para los racimos que contienen no menos de dos nudos.) *Al aplicar diferencia de potencial a cualquier par de nudos pertenecientes a diversos racimos, el circuito no se cerrará y la corriente eléctrica no fluirá.* Si $x < x_c$, en el sistema sólo habrá racimos con un número finito de nudos, y por eso, al aumentar las dimensiones del sistema, la corriente eléctrica a través de los electrodos laterales se interrumpirá inevitablemente tarde o temprano. Pero si en un sistema muy grande $x > x_c$, en las caras laterales del mismo siempre habrá nudos pertenecientes a un racimo infinito. Precisamente ese racimo infinito asegurará la electroconductibilidad específica $\sigma(x)$ distinta de cero y la cual no dependerá de las dimensiones del sistema.

Volvamos a la figura 10 donde están representadas las funciones $P(x)$ (porción de nudos pertenecientes a un racimo infinito) y $\sigma(x)/\sigma(1)$ ($\sigma(1)$ es la electroconductibilidad cuando $x = 1$, es decir, cuando no hay nudos bloqueados). Ambas funciones se reducen a cero en un mismo punto, el cual al principio fue llamado umbral de percolación, y después, punto donde surge un racimo infinito.

Por lo tanto, todo el tiempo se trataba del problema de la teoría de percolación, que se llama problema de los nudos. Si nos interesara el valor de x_c para una "sustancia ferromagnética plana", hubiéramos podido decir, valiéndonos del resultado del experimento con la rejilla, que éste es igual a 0,59. Sin embargo, las materias ferromagnéticas reales se cristalizan en redes volumétricas (de tres dimensiones) y no en planas. Un ejemplo de

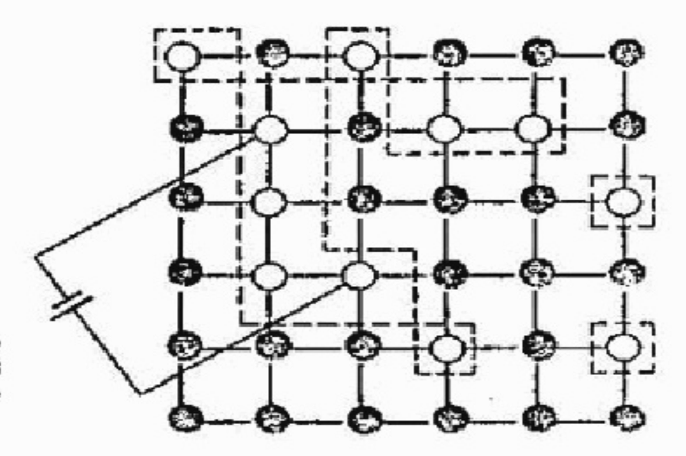


Fig. 11. La misma configuración que en la figura 8, pero los átomos magnéticos están sustituidos por nudos no bloqueados.

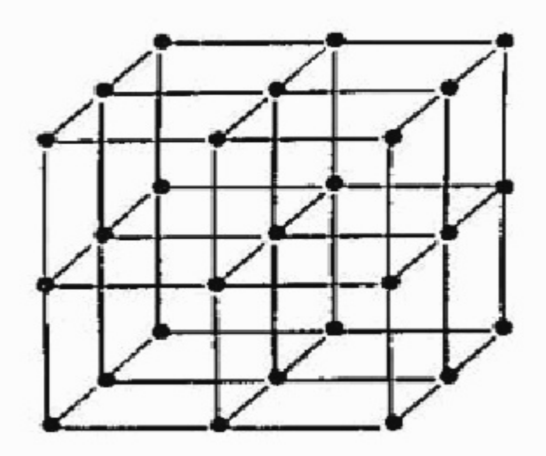


Fig. 12. Red cúbica sencilla.

retículo tridimensional es la red cúbica sencilla, una célula de la cual fue representada en la figura 7.

El problema de la electroconductibilidad de una rejilla protectora se generaliza con facilidad para el caso tridimensional. Imaginémonos un cubo soldado de alambres y que contiene muchas células, como se muestra en la figura 12. En las dos caras opuestas de este cubo pueden ser soldadas placas metálicas, situándolas así como en el circuito eléctrico de la fig. 1, y estudiar la electroconductibilidad en función del número de nudos bloqueados. Al bloquear cada nudo se interrumpe el contacto entre los seis alambres que entran en ese nudo. Al igual que en el caso bidimensional, existe la concentración crítica x_c de los nudos no bloqueados, por debajo de la cual la electroconductibilidad es igual a cero.

El problema de la sustancia ferromagnética con impurezas, así como la idea acerca del racimo infinito, relacionada con este problema, pertenecían en igual medida a los retículos planos y tridimensionales. La concentración crítica de átomos magnéticos x_c, con la cual surge un racimo infinito, es a la vez el umbral de percolación de una cara a otra en un cubo bastante grande. Hay que tener en cuenta que la propia variable x_c depende en sumo grado del tipo de retículo. Si para una red cuadrada esa variable era igual a 0,59, para un retículo cúbico sencillo $x_c = 0{,}31$. (Véase más detalladamente el capítulo 6.)

RACIMOS CON BAJA CONCENTRACIÓN DE ÁTOMOS MAGNÉTICOS**

Las conclusiones sacadas en los apartados anteriores se basaban principalmente en la afirmación de que con poca concentración de átomos magnéticos x, éstos, por lo general, se

sitúan de uno en uno, y los racimos de dos átomos son raros, de tres, aún más, etc. Demostremos dicha afirmación.

Introduzcamos la función $P_{\mathscr{M}}(x)$, es decir, la probabilidad de que el átomo elegido al azar pertenezca a un racimo integrado por no menos de $\mathscr{M}$ átomos. Esto significa que ese átomo: a) es magnético, b) está enlazado con no menos de $\mathscr{M} - 1$ de otros átomos magnéticos. Calculemos la función $P_{\mathscr{M}}(x)$ *cuando* $\mathscr{M} = 1$ y $\mathscr{M} = 2$.

La función $P_1(x)$ es igual a la probabilidad de que el átomo elegido al azar resulte magnético. Esta probabilidad es igual a x (véase el ejercicio 1 en el capitulo 2, donde es necesario sustituir la palabra "no bloqueado" por la palabra "magnético", y la palabra "bloqueado" por la palabra "no magnético"). Así pues,

$$P_1(x) = x\,. \tag{1}$$

La función $P_2(x)$ equivale a la probabilidad de que el átomo elegido al azar sea magnético y de que, en este caso, entre los átomos inmediatos a él haya, por lo menos, un átomo magnético más. Los dos acontecimientos indicados son, evidentemente, independientes y por eso la probabilidad buscada puede representarse en forma del producto de las probabilidades de tales acontecimientos. Como la primera de ellas (la probabilidad de que el átomo sea magnético) es igual a x, entonces

$$P_2(x) = xW(x)\,, \tag{2}$$

donde $W(x)$ es la probabilidad de que entre los átomos inmediatos a cierto átomo haya, por lo menos, un átomo magnético. La función $W(x)$ depende del tipo de retículo sometido a examen. Limitémonos a una red cuadrada en la que cada átomo tiene cuatro átomos inmediatos (fig. 13). Es preciso hallar la probabilidad de que por lo menos uno de los átomos *1*, *2*, *3* y *4* sea magnético.

Este problema se resuelve fácilmente del modo siguiente. El acontecimiento que consiste en que todos los cuatro átomos son

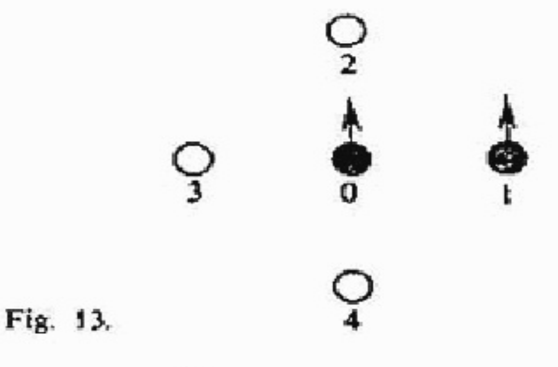


Fig. 13.

no magnéticos, y el acontecimiento que consiste en que por lo menos uno de los cuatro átomos es magnético, constituyen un sistema completo de acontecimientos. La suma de probabilidades de ambos acontecimientos equivale a la unidad. Designemos por W_0 la probabilidad del primer acontecimiento, mientras que la probabilidad del segundo es, precisamente, la variable buscada W. Así, $W + W_0 = 1$. La probabilidad de que el átomo *1* sea no magnético constituye $1 - x$. La probabilidad de que el átomo *2*, o el *3*, o el *4* sean no magnéticos también constituye $1 - x$. Los acontecimientos que consisten en que diversos átomos resultaron no magnéticos, son acontecimientos independientes. Por eso la probabilidad de que los cuatro átomos sean no magnéticos es igual al producto de cuatro probabilidades: $W_0 = (1 - x)^4$. De aquí se deduce que $W = 1 - W_0 = 1 - (1 - x)^4$. De acuerdo con la fórmula (2),

$$P_2(x) = x\left[1 - (1 - x)^4\right]. \tag{3}$$

Si $x \ll 1$, la expresión para $P_2(x)$ puede ser simplificada eliminando los términos con altas potencias de x. Utilizando la fórmula del binomio, obtenemos

$$1 - (1 - x)^4 = 4x - 6x^2 + 4x^3 - x^4.$$

Ahora notemos que si $x \ll 1$, la relación entre cada término ulterior y el término anterior es pequeña:

$$\frac{6x^2}{4x} = \frac{3}{2}x \ll 1, \quad \frac{4x^3}{6x^2} = \frac{2}{3}x \ll 1 \quad \text{y} \quad \frac{x^4}{4x^3} = \frac{x}{4} \ll 1.$$

Por eso para $x \ll 1$, con buena precisión se puede escribir

$$1 - (1 - x)^4 \approx 4x,$$

de donde se deduce

$$P_2(x) \approx 4x^2. \tag{4}$$

Comparando las fórmulas (1) y (4), vemos que cuando $x \ll 1$, la relación

$$\frac{P_2(x)}{P_1(x)} \approx 4x \ll 1, \tag{5}$$

es decir, la probabilidad de que el átomo elegido al azar pertenezca a un racimo de dos y más átomos es mucho menor que la probabilidad de que el mismo forme un racimo de un átomo.

Existe una deducción más sencilla de la fórmula (4) para $P_2(x)$, en la que de inmediato se toma en consideración la condición $x \ll 1$. Valiéndose de tal deducción es posible calcular, con relativa

facilidad, las funciones $P_{\mathcal{M}}(x)$ para $\mathcal{M} > 2$ (véase el ejercicio 3). La deducción consiste en lo siguiente: el racimo de más de dos átomos, que contiene el átomo *0*, siempre comprende el átomo *1*, o el *2*, o el *3*, o el *4*. La probabilidad de que los átomos *0* y *1* pertenezcan a un racimo, es igual a la probabilidad de que ambos sean magnéticos, y equivale al producto de las probabilidades de que cada uno de ellos sea magnético, es decir, $x \cdot x = x^2$. Lo mismo se puede decir de la probabilidad de que el racimo sea formado por átomos *02*, *03* ó *04*. Todas esas probabilidades son iguales a x^2. La probabilidad de que se realice, por lo menos, uno de dichos acontecimientos equivale a la suma de tales probabilidades, es decir, a $4x^2$, lo cual precisamente conduce a la fórmula (4).

Esta deducción sólo es justa cuando $x \ll 1$. Unicamente en este caso puede utilizarse la regla de adición de las probabilidades. En efecto, la regla de adición es justa para acontecimientos incompatibles. Pero el acontecimiento que consiste en que los átomos *0* y *1* resultaron magnéticos, *es compatible* con el hecho de que los átomos *0* y *2* también resultaron magnéticos. La coincidencia de los acontecimientos significa que los tres átomos *0*, *1* y *2* son magnéticos y, por consiguiente, forman un racimo de *tres* átomos. La probabilidad del acontecimiento coincidente es igual al producto de las probabilidades de que los tres átomos sean magnéticos, es decir, es igual a $x \cdot x \cdot x = x^3$.

Cuando $x \ll 1$, esta probabilidad es mucho menor que la probabilidad calculada de formación de un racimo de dos átomos. Por eso puede ser despreciada la probabilidad de coincidencia de los acontecimientos y examinarlos como incompatibles. Precisamente esto justifica la conclusión sacada más arriba, a condición de que $x \ll 1$.

De hecho, eso significa que si $x \ll 1$, al calcular $P_2(x)$ es posible despreciar la probabilidad de que se forme un racimo de tres átomos.

Por lo tanto, cuando $x \ll 1$, la función $P_2(x)$ en realidad coincide con la probabilidad de que el nudo elegido al azar pertenezca a un racimo de *dos* (¡y no más!) átomos. Respectivamente, la función $P_3(x)$ describe un racimo de tres átomos. La misma es proporcional a x^3 y es pequeña en comparación con $P_2(x)$. El resultado general consiste en que la función $P_{\mathcal{M}}(x)$ contiene potencias de x no menores de $x^{\mathcal{M}}$, y cuando $x \ll 1$ obtenemos $P_{\mathcal{M}}(x) \ll P_{\mathcal{M}-1}(x)$.

Por consiguiente, si cuando $x \ll 1$ el nudo elegido al azar resultó magnético, éste formará, con máxima probabilidad, un racimo de un átomo. La probabilidad de que el mismo pertenezca a un racimo de $\mathcal{M}$ nudos disminuye bruscamente con el crecimiento de $\mathcal{M}$.

2. Hallar $P_2(x)$ para la red cúbica sencilla representada en la figura 12. Para cualquier retículo en el que cada átomo tiene z átomos inmediatos.

3. Hallar $P_3(x)$ para una red cuadrada, valiéndose de la condición $x \ll 1$.

4. Hallar $P_3(x)$ para un retículo cuadrado, sin utilizar la condición $x \ll 1$.

Capítulo 4
SOLUCIÓN DEL PROBLEMA DE LOS NUDOS POR EL MÉTODO DE MONTECARLO, MEDIANTE UN ORDENADOR

El método de Montecarlo es el procedimiento más difundido de solución de los problemas de la teoría de percolación. El objeto de este capítulo es dar una idea general sobre este método, explicar detalladamente cómo funciona el elemento principal del método, es decir, el generador de números aleatorios, y aducir, en conclusión, el programa concreto para un ordenador, que permita hallar el umbral de percolación del problema de los nudos. Probablemente que la primera pregunta que surge es la siguiente:

¿POR QUÉ MONTECARLO?

"– ¿Qué es eso de cero? ¿Has oído que el *croupier* chato de pelo crespo, el principal, acaba de anunciar el cero? ¿Y por qué barre todo lo que hay en la mesa? Se ha llevado un montón de dinero. ¿Qué significa eso?

– El cero, Antonida Vasílievna, quiere decir que la banca ha ganado. Si la bolita cae en el cero, todo lo de la mesa pertenece a la banca. Es cierto que puede usted salvar lo apostado; pero la banca no paga nada.

– ¡No digas eso! ¿De modo que no gano nada?

– Nada, babouschka[1]; pero si hubiese apostado al cero, ganaría treinta y cinco veces su postura.

– ¡Qué me dices! ¿Treinta y cinco veces? ¿Y ocurre eso con frecuencia? ¿Por qué no apuestan al cero los tontos?

---

[1] Babouschka (bábushka), voz rusa, diminutivo de la palabra abuela.– (*Nota del traductor.*)

– Porque tienen treinta y seis probabilidades contra una.

– ¡Qué tontería! ¡Potápich! ¡Potápich! ¡Aunque, calla! Llevo dinero encima.

Sacó del bolsillo un monedero bien repleto y tomó un federico oro.

– Toma. Ponlo en seguida al cero.

– El cero acaba de salir, abuela, y tardará mucho en volver a tocar. Perdería usted un dineral. Aguarde un poco al menos.

– ¡Qué necedades! ¡Ponlo, te digo!

– Como usted quiera; pero a lo mejor no sale hasta la noche y puede perder miles. No sería la primera vez.

– ¡Sandeces, sandeces! Si tienes miedo al lobo no vayas al bosque. ¿Qué? ¡He perdido? ¡Pon otro!"[1]

Este fragmento de la novela de Fiódor M. Dostoyevski "El jugador"[2] describe el juego más frenético del siglo pasado, la ruleta. La ciudad de Montecarlo, situada en el principado de Mónaco, se ganó la fama de capital mundial de la ruleta. Precisamente en honor a esta ciudad fue llamado uno de los métodos matemáticos más potentes de nuestros días.

¿Qué hay de común entre este método y la ruleta? Pues que el elemento principal del método de Montecarlo es la misma bola giratoria que en numerosas salas de juego de esa ciudad rige los destinos de la gente, sumiendo a unos y ascendiendo a otros. Es verdad que los matemáticos perfeccionaron considerablemente ese método. Ya no es una bola, ni mucho menos, sino que es el programa estándar de un ordenador, el cual se denomina "generador de números aleatorios". Pero la esencia del asunto no ha cambiado en absoluto. La bola de la ruleta, desde el punto de vista matemático también es de por sí un generador de números aleatorios.

---

[1] Debemos notar que desde el punto de vista de la teoría de las probabilidades, la exaltada abuela sin experiencia, manifiesta mayor sentido común que el Jugador que la consulta. La probabilidad de salida del cero no disminuye en nada a pesar de que éste salió anteriormente. Esperar, como aconseja el Jugador, no tiene ningún sentido. Esta equivocación frecuente, por lo visto se basa en el entendimiento incorrecto del hecho de que es muy pequeña la probabilidad de obtener dos veces seguidas el cero. Pero eso no significa, ni mucho menos, que si una vez salió el cero, la probabilidad de su salida la vez siguiente es menor que en la primera. Claro está que la probabilidad sigue siendo exactamente la misma.

[2] Fedor M. Dostoievski, colección "Sepan cuantos...": Las noches blancas, El jugador, Un ladrón honrado, cuarta edición, Editorial Porrúa, S. A., México, 1981, pág. 80.–(*Nota del traductor.*)

Por regla general, llámase método de Montecarlo cualquier procedimiento matemático en el que se utiliza en sumo grado un generador de números aleatorios.

Por lo común, el ordenador moderno tiene un programa estándar que genera los números aleatorios distribuidos uniformemente en el intervalo de cero a la unidad, es decir, que "sortea" los valores de la variable aleatoria infinita que adoptan, con igual probabilidad, todos los valores en el intervalo (0, 1).

Cada vez que recurrimos a este programa, obtenemos un número con cierta cantidad de cifras después de la coma, que depende de la clase del ordenador.

La aplicación más sencilla del método de Montecarlo consiste, por ejemplo, en el cálculo de integrales. Supongamos que es necesario calcular el volumen limitado por una superficie cerrada de forma complicada. Elijamos un cubo que contiene a ciencia cierta toda esa superficie (fig. 14). Con ayuda del generador de números aleatorios obtenemos un conjunto de puntos distribuidos uniformemente dentro del cubo. Esto se hace del modo siguiente. Supongamos que la longitud de la arista del cubo es igual a L y que las tres coordenadas de los puntos contenidos en él cambian de cero a L (fig. 14). Recurriendo tres veces al generador de números aleatorios, obtenemos tres números: y_1, y_2, y_3 situados en el intervalo (0, 1). Construyamos con ellos las coordenadas del primer punto situado dentro del cubo, según las fórmulas $X_1 = Ly_1$, $Y_1 = Ly_2$, $Z_1 = Ly_3$. Tras realizar tal procedimiento Q veces, obtenemos Q puntos que, por término medio, llenan el

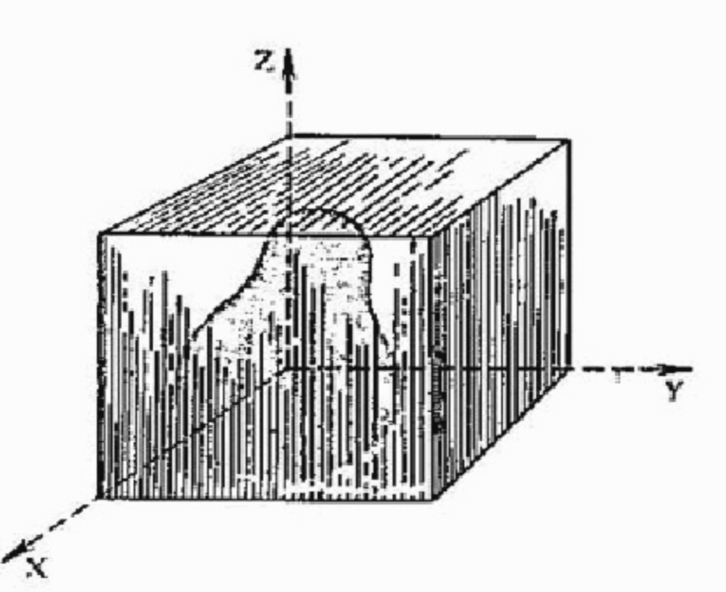


Fig. 14. Determinación del volumen de una pera por el método de Montecarlo.

cubo uniformemente. Supongamos que Q_1 es el número de puntos que resultaron dentro de la referida superficie. Como dichos puntos permanecen uniformemente distribuidos, el número Q_1 caracterizará el volumen limitado por tal superficie. Precisamente si el número Q es bastante grande, el volumen buscado constituirá L^3Q_1/Q.

Existe una teoría que permite decir qué número de puntos Q se necesita para obtener un resultado de precisión requerida. Este problema puede ser enfocado empíricamente, repitiendo varias veces el experimento y utilizando otros conjuntos de números aleatorios y comparando posteriormente los resultados. Si no cambia nada dentro de los límites de la exactitud establecida, eso significará que todo está en orden y la solución es correcta. En el caso de espacios de gran número de mediciones (de integrales múltiples), el método de Montecarlo tiene ventajas considerables en comparación con los procedimientos de integración ordinarios.

En una serie de casos el método de Montecarlo es el único posible. Imagínense que se estudia el comportamiento de un sistema constituido por un número enorme de partículas, por ejemplo, el comportamiento de un gas. En principio tal problema debe resolverse mediante los procedimientos de la física estadística, sin embargo, si la interacción de las partículas es muy fuerte (así sucede en condiciones de gran densidad y a temperaturas muy bajas), estos procedimientos no son eficaces. En este caso las propiedades del gas se estudian con ayuda de la simulación en un ordenador. El número de partículas del gas que participan en la simulación se determina por el volumen de la memoria del ordenador. En dicha memoria debe conservarse la información sobre las coordenadas de todas las partículas. La simulación consiste en que arbitrariamente se elije una de las partículas que después se desplazará a una distancia aleatoria. (Esto significa que en la memoria del ordenador cambian las coordenadas de esa partícula). Luego se elige arbitrariamente otra partícula, etc. La energía potencial de interacción de las partículas del gas depende de su disposición recíproca. Ésta se calcula desde el principio y posteriormente se recalcula después de cada desplazamiento. Las probabilidades de desplazamientos de las partículas a una u otra distancia se eligen de acuerdo con la energía potencial, de tal modo que el sistema de simulación "viva" por término medio lo mismo que el sistema real.

Como resultado, en la memoria del ordenador parece como si se grabaran "fotografías instantáneas" del gas, reproducidas en momentos de tiempo consecutivos. Esas fotografías incluyen las coordenadas de todas las partículas del gas, y a partir de ellas es

posible calcular las características termodinámicas medias, tales como presión, capacidad calorífica, etc.

El propio procedimiento de simulación se asemeja mucho al juego que se realiza según reglas rigurosamente establecidas, las cuales comprenden el modo de recurrir a la ruleta, es decir, al generador de números aleatorios. Las mínimas divergencias de las reglas o el juego a una ruleta "fraudulenta" conducen al hecho de que unas configuraciones de átomos del gas aparecen más a menudo que otras. Eso se refleja en los resultados de promediación y contribuye a la obtención de resultados incorrectos.

El generador de números aleatorios se utiliza no sólo en el método de Montecarlo, sino también en los llamados experimentos análogos, cuyo ejemplo es el experimento con la rejilla protectora descrita en el primer capitulo. Como ya fue dicho, la sucesión arbitraria de los nudos bloqueados, necesaria para tal experimento, se componía en el ordenador. Para elegir el nudo consecutivo es preciso recurrir al programa y obtener el número aleatorio y. Este último ha de multiplicarse por el número total de nudos $\mathcal{N}$ y añadir la unidad al producto obtenido. Luego, de $\mathcal{N}y + 1$ hay que tomar la parte entera. En este caso surgirá un número entero situado en el intervalo requerido de 1 a $\mathcal{N}$. Por supuesto que tales números pueden repetirse, pero eso no debe asustar. Si resulta que el nudo con el número obtenido fue bloqueado anteriormente, es necesario exigir del ordenador un número aleatorio nuevo y convertirlo en número del nudo.

Más adelante será descrito el programa con cuya ayuda se calculan los umbrales de percolación por el método de Montecarlo, pero ahora hablaremos del elemento más importante de este método: del generador de números aleatorios.

¿CÓMO INVENTAR UN NÚMERO ALEATORIO?

Así, Uds. necesitan números aleatorios distribuidos uniformemente en el intervalo de cero a la unidad. Pero con esto la tarea aún no ha sido formulada. Es preciso saber cuántas cifras después de la coma se necesitan en cada número. Supongamos que se requieren sólo dos cifras. En este caso la receta más sencilla consiste en lo siguiente. Tomen la guía de teléfonos, ábranla en cualquier página y copien seguidamente las dos últimas cifras de cada número telefónico, poniendo delante de ellas "0". Obtendrán una tabla de dos cifras de números aleatorios. ¿Y qué hacer si se exigen números de diez cifras? Tal vez en este caso Uds. no puedan prescindir del ordenador.

Si pensamos un poco, la propia idea de que el ordenador puede generar números aleatorios, parecerá extraña. Pues precisamente los ordenadores funcionan con arreglo al algoritmo que se les propone, es decir, realizan con exactitud las acciones que exige de ellos el hombre. ¿Cómo, pues, introducir en estas acciones el elemento de casualidad?

En realidad *no hay ningún elemento de casualidad en el programa del generador de números aleatorios.* El principio de su funcionamiento consiste en lo siguiente. Al recurrir por primera vez al programa hay que prefijar cierto número y_0. Con ayuda de una sucesión de acciones, absolutamente determinada, este número se transforma en un número nuevo:

$$y_1 = \Phi(y_0), \tag{1}$$

donde Φ es la función o sucesión de operaciones, seleccionada de cierto modo, que transforma y_0 en y_1. Precisamente esa función determina el algoritmo de generación de números aleatorios. A su vez, el número y_1 sirve de base para obtener el número siguiente y_2 según la misma receta:

$$y_2 = \Phi(y_1). \tag{2}$$

Por supuesto que la función Φ está estructurada de tal modo que todos los números $y_1, y_2, \ldots, y_n$ satisfacen las desigualdades $0 \leqslant y_n \leqslant 1$. Éstas son precisamente los números aleatorios buscados.

Es fácil cerciorarse de que la sucesión de números obtenida de tal modo no puede ser infinita. En efecto, el ordenador opera solamente con números que contienen una cantidad determinada de cifras (órdenes). La cantidad de tales números es limitada. (Sólo existen 10^2 números de dos cifras y 10^n de n cifras.) Por eso tarde o temprano el número consecutivo y_n coincidirá con el número anterior, por ejemplo, con y_{n-L}. Después de esto todo comenzará a repetirse: y_{n+1} coincidirá con y_{n-L+1}, etc.

Por lo tanto, la sucesión de números, obtenida mediante las fórmulas (1) *y* (2), *resulta periódica inevitablemente.* Por eso tales números no se denominan números verdaderamente aleatorios, sino que adquirieron el nombre de números *seudoaleatorios* (es decir, son algo asi como aleatorios o parecidos a ellos).

Sin embargo, los mismos pueden utilizarse como aleatorios si la cantidad de números necesarios para resolver dicho problema es menor que el período de sucesión L.

A su vez, el período L se determina a partir de la cantidad de signos decimales con los que opera el ordenador (es decir, según la cantidad de células de memoria concedidas a cada número), así

como conforme a la cualidad del algoritmo (es decir, con arreglo a las propiedades de la función Φ que figura en las fórmulas (1) y (2)).

La elaboración de un buen generador de números aleatorios es un problema muy complicado. Los generadores elaborados al azar resultan, por lo general, malos. Más abajo se examinan algunos generadores concretos.

MÉTODO DE CENTRO DEL CUADRADO

Históricamente es el primer método de generación de números seudoaleatorios en un ordenador. El mismo fue propuesto en el año 1946 por el insigne matemático John von Neumann. Este método permite generar números con cualquier cantidad de cifras que correspondan a las posibilidades del ordenador. Es un método muy sencillo. Supongamos que se necesitan números de cuatro cifras. Elegimos arbitrariamente el primer número X_0. Por ejemplo, $X_0 = 8219$. Lo elevamos al cuadrado. Obtenemos el número $67\underline{5519}61$ de ocho cifras. Extraemos las cifras centrales: 5519. El siguiente número de la sucesión es $X_1 = 5519$. Elevamos al cuadrado 5519 y obtenemos $30\underline{4593}61$. El siguiente número aleatorio es $X_2 = 4593$. Si las primeras cifras centrales son ceros, obtenemos un número con menor cantidad de cifras. Por ejemplo, $X_2^2 = 21\underline{0956}49$, $X_3 = 956$. Al elevarlo al cuadrado es necesario obtener un número de ocho cifras, escribiendo adelante los ceros, $X_3^2 = 00\underline{9139}36$, así que $X_4 = 9139$, etc.

Los números aleatorios y_n, distribuidos uniformemente en el intervalo de cero a la unidad, se obtienen de los números X_n mediante la fórmula $y_n = X_n/10^4$, donde $n = 0, 1, 2, 3, \ldots$, así que $y_0 = 0{,}8219$; $y_1 = 0{,}5519$; $y_2 = 0{,}4593$, etc.

A primera vista el método parece bueno. Pero la investigación minuciosa ha demostrado que eso no es así ni mucho menos. Su principal defecto consiste en que con algunos números iniciales, la sucesión "se unifica en el ciclo". Por ejemplo, se aclaró que en la clase de números de cuatro cifras, las sucesiones a menudo finalizan en el ciclo 6100, 2100, 4100, 8100 y 6100. El período de ciclo equivale tan sólo a cuatro, lo cual, por supuesto, no sirve para nada.

Existe un número que inmediatamente se reproduce a sí mismo. Es el número 3792 ($3792^2 = 14\underline{3792}64$). También se reproduce a sí mismo el cero, mientras que muy a menudo las sucesiones obtenidas por el método de centro del cuadrado se reducen a cero. Por eso en nuestros días, este método sólo representa interés histórico.

EJERCICIOS

1. Componer la sucesión de números de cuatro cifras comenzando por 0085, 0067 y 0032. Demostrar que todos ellos son monótono-decrecientes (cada número siguiente es menor que el anterior) y que muy rápidamente se reducen a cero.

2. Ahora demostrar que eso es un defecto general del método de centro del cuadrado: si se utilizan números de $2n$ cifras X_i, y en la sucesión apareció el número b, cuyas cifras mayores n son iguales a cero, entonces, desde este momento, la sucesión se vuelve monótono-decreciente y, al fin y al cabo, se reduce a cero.

MÉTODO CONGRUENTE LINEAL

Actualmente este método de obtención de números aleatorios se estima que es el mejor. Su esencia consiste en lo siguiente. Se eligen cuatro números positivos enteros:

1. Factor k;
2. Desplazamiento c;
3. Módulo m;
4. Primer número de la sucesión X_0.

La sucesión de números aleatorios se determina por la fórmula

$$X_{n+1} = (kX_n + c) \text{ mód } m, \tag{3}$$

donde el índice n recorre los valores 0, 1, 2, ... El símbolo b mód m constituye el resto de la división del número b por m. Por ejemplo,

b	25	6	30	3	147
m	10	10	10	12	12
b mód m	5	6	0	3	3

Es evidente que b mód $m < m$. Por esta razón, todos los números de la sucesión X_n satisfacen la desigualdad $X_n < m$. La sucesión de números y_n, distribuidos uniformemente en el intervalo de cero a la unidad, se obtiene por medio de la fórmula

$$y_n = \frac{X_n}{m}, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{4}$$

Se entiende que no cualquier elección de cuatro números iniciales conduce a buenos resultados. Antes que nada señalemos que la sucesión de números X_n ha de ser obligatoriamente periódica, además, el período no puede superar m. En efecto, como todos X_n son números enteros, además, $X_n < m$, la cantidad de

números diferentes no puede superar m. Por consiguiente, empezando al menos por $n = m$, aparecerá un número con el que ya hemos tropezado, y todo se repetirá de nuevo.

Pero no es tan fácil obtener una sucesión con el período máximo posible $L = m$. Si elegimos números iniciales sin pensar, por regla general obtendremos sucesiones de pequeño período.

EJERCICIOS

3. Escriban la sucesión de números X_n que se desprende de la fórmula (3), con $k = 3$, $c = 0$, $X_0 = 5$, $m = 20$.

4. Escriban la sucesión de números X_n que se deduce de la fórmula (3), con $k = 3$, $c = 1$, $X_0 = 5$, $m = 20$.

5. Escriban la sucesión de números X_n que se deduce de la fórmula (3), con $k = 3$, $c = 2$, $X_0 = 5$, $m = 20$. Cerciórense de que en los tres casos el periodo de sucesión es mucho inferior a 20. Examinen otros ejemplos.

Ha sido demostrado el siguiente TEOREMA. *Si la sucesión se determina por la fórmula* (3), *con* $c \neq 0$, *su período es igual a* m *si, y solamente si se cumplen las siguientes condiciones*:

a) c y m son números primos recíprocamente (no tienen divisores comunes, salvo la unidad);

b) $b = k - 1$ es múltiplo de p para cualquier número primo p que es divisor de m;

c) b es múltiplo de 4 si m es múltiplo de 4.

Desgraciadamente, la demostración de este teorema es muy complicada para exponerla aquí.

6. Cerciórense de que en todos los ejemplos dados en los ejercicios 3...5, las condiciones dictadas por el teorema enunciado más arriba no se cumplían.

7. Cerciórense de que el conjunto de números $k = 11$, $c = 3$, $m = 5$ satisfacen las condiciones del teorema, y que con todos X_0 se obtiene un periodo $L = 5$.

Así, para obtener un generador con el período máximo posible L, es necesario adoptar en calidad de m el mayor número con el que pueda operar un ordenador dado, y elegir los demás números con arreglo al teorema expuesto anteriormente.

Sin embargo, el período no es el único índice que determina la calidad de la sucesión aleatoria. Examinemos, por ejemplo, la sucesión correspondiente a $k = c = 1$. Ésta tiene el aspecto 0, 1, 2, 3, ..., $m - 1$, 0, 1, 2, 3, ..., $m - 1$, 0, ... Su período es igual a m, pero es una sucesión aleatoria que no sirve para nada.

Ha sido elaborado un sistema complicado de ensayos que permite determinar las cualidades del generador de números

aleatorios. Por eso se recomienda utilizar sólo generadores comprobados.

Al elegir el generador, las propiedades del ordenador son importantes no sólo para elegir el período máximo posible. De la elección de los números iniciales también depende la velocidad de generación de números aleatorios. En este caso resulta que para ordenadores de distintas estructuras son óptimos diversos generadores.

En los programas que trabajan a base del método de Montecarlo se prevé la frecuente utilización (decenas y centenas de millones de veces) del generador de números aleatorios. Por eso la velocidad de acción de éste es una de sus cualidades más importantes.

Para ordenadores de marca BECM-6 (БЭСМ-6) se recomiendan generadores con $k = 5^{17}$, $c = 0$, $m = 2^{40}$ y valores impares de X_0. Este conjunto de números no satisface las exigencias del teorema expuesto más arriba ($c = 0$), y el período de tal generador es menor que m. Sin embargo, para los generadores con $c = 0$ ha sido demostrado otro teorema, de acuerdo con el cual el período del generador recomendado es igual a $2^{38} \approx 2{,}75 \times \times 10^{11}$.

DETERMINACIÓN DEL UMBRAL DE PERCOLACIÓN POR EL MÉTODO DE MONTECARLO, MEDIANTE UN ORDENADOR. DISTRIBUCIÓN DE LOS NUDOS BLOQUEADOS Y NO BLOQUEADOS

Ahora será detalladamente descrito el programa según el cual funciona el ordenador al determinar el umbral de percolación por el método de Montecarlo. Cabe señalar que este programa no es el único ni mucho menos. A su vez, cada grupo de investigadores ocupados de estas cuestiones prefiere utilizar su propio programa que, en mayor o menor grado, difiere de los demás. Esto está relacionado, en parte, con las singularidades de los diversos ordenadores y, en parte, simplemente con la experiencia individual de los programadores.

Se trata del problema de los nudos, además, para simplificar se examina solamente un retículo cuadrado plano. Por lo demás, como será visto en adelante, la generalización del método para cualquier retículo de cualquier dimensión no requiere mucho trabajo.

Supongamos que es necesario estudiar la percolación en un cuadrado, uno de cuyos lados contiene L nudos, por lo cual, el

número total de nudos $\mathcal{N} = L^2$. Consideremos que la distancia entre los nudos es igual a la unidad y caractericemos estos últimos por las coordenadas X e Y. Por ejemplo, el nudo con coordenadas $X = 9$, $Y = 25$ es el que se encuentra en la novena columna izquierda y en la vigésimaquinta fila desde abajo.

Para estudiar la percolación es necesario establecer cuál de los nudos está bloqueado, y cuál no, y tener la posibilidad de cambiar el número de nudos bloqueados, a fin de que los mismos pasen por el umbral de percolación. Con este propósito, inicialmente cada nudo será anotado con cierto número V. Como el nudo se caracteriza por dos coordenadas X e Y, esto equivale al hecho de que se introduzca la función de dos variables $V(X, Y)$ cuyos argumentos recorren no todos los valores y sólo pueden ser números enteros en el intervalo de 1 a L. En la programación, tal función se denomina bloque bidimensional, y los valores que ella adquiere se llaman elementos de este bloque. Por ejemplo, el elemento del bloque $V(31, 97)$ es cierto número perteneciente al nudo con coordenadas $X = 31$, $Y = 97$. El bloque V sólo tiene $L \times \times L = \mathcal{N}$ elementos, mientras que en la memoria del ordenador es preciso reservar un lugar necesario para registrar $\mathcal{N}$ números.

El programa comienza por la elaboración del referido bloque. Sus elementos son los números aleatorios distribuidos uniformemente de cero a la unidad. El generador de números aleatorios proporciona el número y, y con éste se anota el elemento del bloque $V(1, 1)$. Eso significa que dicho número se escribe en la respectiva célula de la memoria del ordenador y, a partir de este momento, este último "recordará" que $V(1, 1) = y$. Con el siguiente número proporcionado por el generador se anota el elemento $V(1, 2)$, etc. Así se elaboran todos los elementos del bloque V.

Seguidamente se elabora el segundo bloque bidimensional que será designado por K. Los elementos de este bloque son ceros y unidades, además, si, por ejemplo, $K(25, 16) = 0$, eso significa que el nudo con coordenadas $X = 25$, $Y = 16$ permanece bloqueado, y si $K(25, 16) = 1$, ese nudo no está bloqueado. Para elaborar el bloque K se utiliza el bloque V y cierto número t situado en el intervalo de cero a la unidad. Variando el número t es posible modificar el número de nudos bloqueados.

El bloque K se obtiene según la regla siguiente. Tomemos el nudo con coordenadas X e Y. Si $V(X, Y) \leqslant t$, entonces $K(X, Y) = 1$, y si $V(X, Y) > t$, entonces $K(X, Y) = 0$. En el primer caso, el nudo con coordenadas X e Y se considera no bloqueado, y en el segundo, bloqueado. Como las variables V se hallan distribuidas uniformemente en el intervalo de cero a la unidad, y suponiendo que el número t es próximo a cero, resultará que casi todos los nudos

permanecen bloqueados. Y, al contrario, si el número t es próximo a la unidad, entonces casi todos los nudos permanecerán no bloqueados. Cuando $t = 1/2$, el número de nudos bloqueados y no bloqueados debe ser igual aproximadamente.

Utilizando la función de distribución de los números aleatorios proporcionados por el generador, es posible enlazar el número t con la porción media de nudos no bloqueados x, la cual se obtiene como resultado del procedimiento descrito anteriormente. Resulta (véase el ejercicio 8) que $t = x$. Pero esta igualdad es justa cuando el número de nudos $\mathcal{N}$ es muy grande, o cuando son elaborados muchos bloques K con el mismo número t, promediando posteriormente las porciones de nudos no bloqueados obtenidos en cada bloque. Para cada bloque concreto, dicha igualdad puede resultar algo alterada hacia uno u otro lado, con la particularidad de que cuanto mayor sea $\mathcal{N}$, tanto más exactamente ellY ha de cumplirse.

Así pues, en la memoria del ordenador ha sido inscrito el bloque V, y de él puede ser obtenido el bloque K que describe cuál es el nudo bloqueado y cuál es el no bloqueado. El aspecto del bloque K se regula por medio del número t que coincide aproximadamente con la porción de nudos no bloqueados obtenidos en este bloque. Variando suavemente t es posible obtener las distribuciones de los nudos bloqueados y no bloqueados, con una concentración x de nudos no bloqueados que cambia uniformemente.

EJERCICIO

8. Demuestren que la porción media x de nudos no bloqueados en el bloque K es igual a t.

BÚSQUEDA DE VÍAS DE PERCOLACIÓN

Supongamos que ha sido compuesto el bloque V, establecido el número t y hallado el bloque K que contiene cierta porción de nudos no bloqueados.

Ahora el ordenador sabe exactamente cuál de los nudos está bloqueado, y cuál no, comenzando la segunda etapa del programa: la búsqueda de vías de percolación. Supongamos que la percolación se estudia de izquierda a derecha. Antes que nada, todas las unidades situadas en la columna izquierda extrema ($X = 1$) adquieren un nuevo nombre: doses. El cambio de nombre consiste en que en la célula de la memoria, correspondiente a un elemento dado del bloque K, se borra la unidad y se escribe un dos.

En la memoria del ordenador se confecciona la lista de las coordenadas de los nudos llamados ahora doses. Luego el ordenador estudia cada nudo de esa lista y calcula qué nudos son los más inmediatos al nudo sometido a estudio y exige del bloque *K* datos acerca de dichos nudos. Si el nudo inmediato resultó la unidad, el mismo adquiere el nombre de dos y sus coordenadas se apuntan en la nueva lista. Tras terminar el estudio de la primera lista, en la memoria del ordenador resulta la lista de doses de la "segunda generación", es decir, la lista de unidades que adquirieron el nombre de doses, gracias a que se encontraban en cantacto con los doses de la primera generación.

A fin de ahorrar la memoria del ordenador, en esta etapa se borra la primera lista que ya no sirve más, y se liberan las respectivas células de la memoria. La máquina pasa al estudio de la segunda lista y a la formación de la lista de doses de la tercera generación. Al terminar dicha operación se borra la segunda lista y se inicia el estudio de la tercera. Esta operación va acompañada de la formación de la cuarta lista, etc.

En el transcurso del referido proceso aumenta el número de doses en el bloque *K*. Los doses son los nudos no bloqueados enlazados, mediante la vía de percolación, con cualquier nudo no bloqueado de la columna izquierda extrema, es decir, con los doses se marcan las vías de percolación.

El proceso de búsqueda de vías de percolación cesa en dos casos:

1. En el lado derecho del cuadrado apareció aunque sea un dos. El ordenador indica que con un valor dado de *t* existe percolación.

2. En el lado derecho del cuadrado no hay doses y el estudio de la siguiente lista no condujo a la formación de ningún dos nuevo. Eso significa que se cortaron todas las vias y que con un valor dado de *t* no hay percolación.

DETERMINACIÓN DEL UMBRAL

Supongamos que con un valor dado de *t* existe percolación. Entonces el ordenador reduce ese valor de *t* y, utilizando el mismo bloque *V*, halla un nuevo bloque *K* con menor número de nudos no bloqueados. De nuevo comienza la búsqueda de vías de percolación. Si ésta se manifiesta otra vez, el número *t* se reduce aún más, y asi se procede hasta que con cierto valor de *t* se aclare que no hay percolación. Entonces el intervalo entre ese valor de *t* y su valor mínimo, con el que todavía había percolación, se divide por la mitad y con este valor intermedio de *t* se realiza la búsqueda

de vías de percolación. Si ahora resulta que no hay percolación, entonces el intervalo entre este último valor y el valor mínimo con el que hay percolación, de nuevo se divide por la mitad. Pero si hay percolación, entonces se divide por la mitad el intervalo entre el último valor de t y aquel valor con el que no había percolación.

Así pues, el umbral de percolación se encierra en una especie de "horquilla" que puede estrecharse tanto como se quiera. Si con el primer valor elegido de t no ha surgido percolación, en necesario aumentar t hasta que ésta aparezca, y luego de nuevo hacer una "horquilla". Tal procedimiento permite hallar el valor de t correspondiente al umbral de percolación, con cualquier grado de precisión. Mediante el referido valor de t se calcula la porción de nudos no bloqueados x que, como ya fue dicho, se asemeja al valor de t pero que no es obligatoriamente igual a éste. Precisamente dicho valor de x, obtenido en tal experimento, se declara umbral de percolación. La figura 15 ilustra la primera vía de percolación de iquierda a derecha que apareció en el cuadrado 30×30.

Después se realizan muchos experimentos idénticos que utilizan diversos conjuntos de números aleatorios en el bloque V.

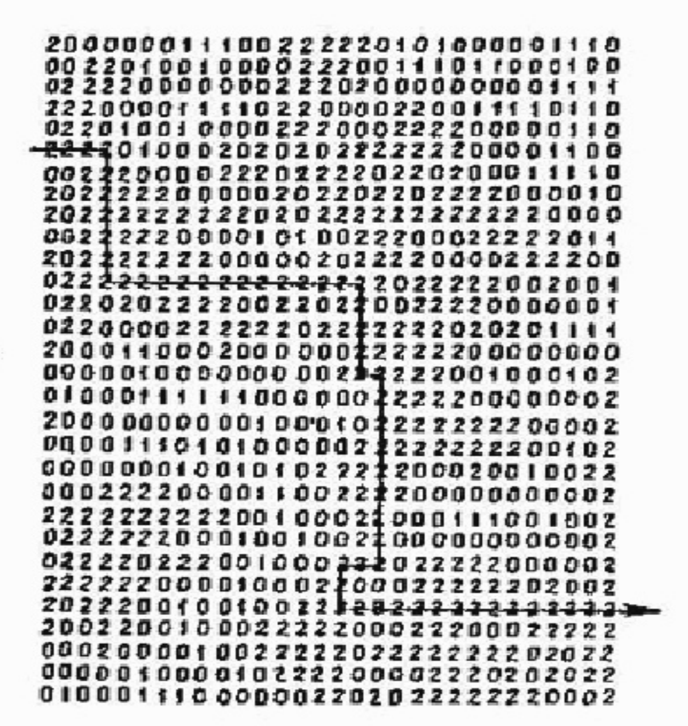


Fig. 15. Cuadro de distribución de los ceros, unidades y doses en el momento de aparición de la percolación. Se indica la vía por la cual los doses "penetraron" del lado izquierdo al lado derecho del cuadrado. En este caso el ordenador no cesó de trabajar al aparecer el primer dos en el lado derecho del cuadrado, y continuó trabajando hasta que dejaron de aparecer nuevos doses.

Esto corresponde al cambio de sucesión aleatoria de los nudos bloqueados en el experimento por medio de una rejilla pantalla. Los resultados de tales experimentos permiten hallar el valor medio del umbral de percolación $x_c(\mathcal{N})$ con un número dado de nudos $\mathcal{N}$. (Para esto es necesario simplemente sumar todos los valores de los umbrales obtenidos y dividirlos entre el número de experimentos.)

Para hallar el verdadero umbral de percolación $x_c = \lim_{\mathcal{N}\to\infty} x_c(\mathcal{N})$ hay que cambiar el número de nudos en el cuadrado $\mathcal{N}$ y obtener la dependencia $x_c(\mathcal{N})$. Para tal dependencia es preciso elegir la siguiente expresión analítica[1]:

$$x_c(\mathcal{N}) = x_c(\infty) + \frac{D}{\mathcal{N}^{\gamma}}, \qquad (5)$$

o sea, es necesario elegir las variables $x_c(\infty)$, D y γ de tal modo que la expresión (5) describa de la mejor manera los resultados obtenidos con ayuda del ordenador. Si esto se realiza de tal modo que $\gamma > 0$, entonces se puede decir que la variable $x_c(\infty)$ también es igual al valor límite de x_c. Efectivamente, de acuerdo con la expresión (5), $\lim_{\mathcal{N}\to\infty} x_c(\mathcal{N}) = x_c(\infty)$. La precisión de tal procedimiento será tanto mayor cuanto más abundantes sean los datos obtenidos para establecer la dependencia $x_c(\mathcal{N})$. Esto, a su vez, depende de la velocidad y el volumen de la memoria del ordenador disponible.

EJERCICIO

9. Examinen con atención la figura 15 y determinen de qué modo aparecía cada grupo de doses.

---

[1] No hay una respuesta precisa a la pregunta de por qué esta expresión depende de $\mathcal{N}$ precisamente de modo exponencial. Pero los resultados de numerosos cálculos indican que eso es así para todos los problemas de la teoría de percolación.

Segunda parte
DISTINTOS PROBLEMAS DE LA TEORÍA DE PERCOLACIÓN Y SU APLICACIÓN

Capítulo 5
PROBLEMAS EN RETÍCULOS PLANOS

PLANTAMOS UN HUERTO FRUTAL (PROBLEMA DE LOS ENLACES)

Se proyecta un huerto frutal de enormes dimensiones. Los árboles en él deben crecer no de cualquier manera, sino regularmente. Los mismos serán plantados en los nudos de cierto retículo (red) periódico trazado en la superficie de la tierra. Se pueden inventar muchos retículos de este tipo, pero nos limitaremos a tres: cuadrado, triangular y hexagonal (este último también es conocido con el nombre de "panal de miel"). Todos ellos están representados en la figura 16.

Claro está que sería deseable plantar los árboles lo más cerca posible uno de otro –la tierra es cara–, pero, por una serie de motivos, eso no se puede hacer. Una de las causas consiste en que

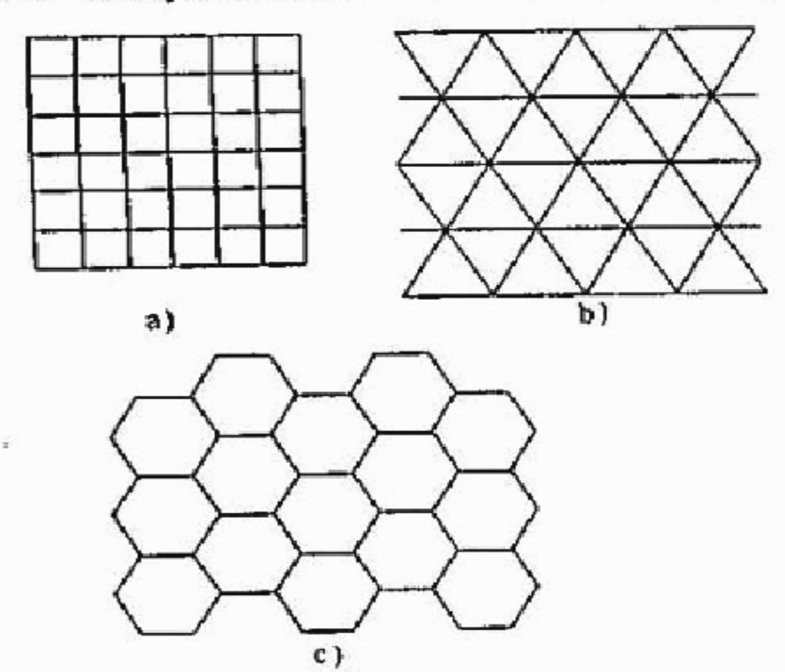


Fig. 16. Retículos planos: *a*) cuadrado; *b*) triangular; *c*) hexagonal ("panales de miel").

los proyectistas toman en consideración las enfermedades contagiosas de los árboles. Supongamos que los especialistas, de acuerdo con las enfermedades de los árboles frutales, comunicaron los siguientes datos [1]:

1. El árbol enfermo sólo puede contagiar a los árboles más inmediatos.

2. Algunos árboles inmediatos se contagian mutuamente siempre que uno de ellos esté enfermo. En otros casos no ocurre contagio. (Esto puede depender, por ejemplo, de la distancia entre las ramas de un determinado par de árboles.) Llamaremos *par enlazado* a dos árboles inmediatos cuyo contagio mutuo es inevitable.

3. Los especialistas también pusieron a nuestra disposición el tipo de función $x(a)$, es decir, la probabilidad de que dos árboles inmediatos elegidos al azar constituyan un par enlazado. Esta probabilidad depende de la distancia a entre los árboles inmediatos en un retículo dado. Naturalmente que la función $x(a)$ aumenta al disminuir el argumento a: cuanto más cerca crezcan los árboles uno de otro, tanto más fácilmente ocurrirá su contagio mutuo.

Debemos contestar a la siguiente pregunta: ¿cuántos árboles pueden ser contagiados por un árbol enfermo? La respuesta sólo puede ser probabilística. Si dicho árbol forma con cualquiera de sus vecinos un par enlazado, el contagio es inevitable. Los árboles enfermos, a su vez, contagian a sus vecinos, etc. Por eso podemos preguntar solamente: ¿cuál es la probabilidad de que el árbol enfermo contagie a cierta cantidad de árboles en el huerto?

Para los razonamientos ulteriores es conveniente pasar a la terminología de los racimos, introducida en el capítulo anterior. Consideraremos que entre dos nudos inmediatos, en los que se encuentran los árboles que forman un par enlazado, hay un *enlace* que representaremos en forma de un alambre que une esos dos nudos. Si los árboles inmediatos no forman un par enlazado, eso significa que el enlace entre ellos (el alambre) está roto (fig. 17).

Diremos que dos nudos están *enlazados*, si entre ellos hay un enlace entero o si los mismos permanecen unidos mediante una cadena continua de nudos inmediatos que tienen entre sí enlaces enteros (por ejemplo, están enlazados entre sí los nudos A y B, así como C y D en la figura 17).

---

[1] El autor no se hace responsable de esta información y por eso recomienda no tomar muy en serio las conclusiones prácticas que se desprenden de la solución del problema aquí planteado. El mismo se expone tan sólo para mostrar las posibilidades de la teoría de percolación.

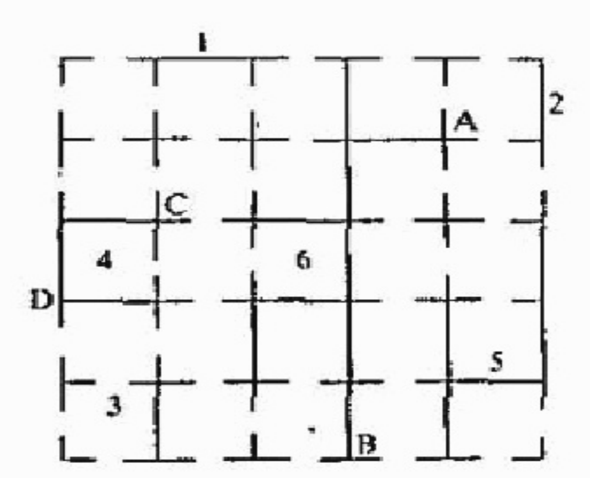


Fig. 17. Fragmento de una red cuadrada con los enlaces rotos. Están representados tres racimos de dos nudos (*1*, *2* y *3*), un racimo de cuatro nudos (*4*), un racimo de seis nudos (*5*) y un racimo de diez nudos (*6*).

Al conjunto de nudos enlazados lo llamaremos racimo. Con arreglo al problema sujeto a examen, la propiedad más importante del racimo consiste en que el árbol enfermo contagia a todos los árboles de su racimo y a ningún otro fuera de éste.

Según la definición, la porción de enlaces enteros es igual a x. Los razonamientos ulteriores son los mismos que en el capítulo 3. Con pequeños valores de x, los enlaces enteros se hallan dispuestos de uno en uno, casi todos los racimos constan de dos nudos, los de tres son raros y los de cuatro aún más. Con grandes valores de x existe un racimo infinito de nudos enlazados. Cuando $x = 1$, a éste le pertenecen todos los nudos del sistema. Al disminuir x, parte de los nudos se desprenden de él y, por último, con cierto valor crítico de x_c, el racimo infinito cesa su existencia.

El racimo infinito es precisamente el daño que puede sufrir el huerto frutal y del cual debemos protegerlo. Supongamos que $P^{en}(x)$ es la probabilidad de que un nudo elegido al azar pertenezca a un racimo infinito. Si $x < x_c$, de tal manera que $P^{en}(x) = 0$, un árbol enfermo sólo puede contagiar a algunos otros árboles. Pero si $x > x_c$, un árbol enfermo es capaz de contagiar, con una probabilidad $P^{en}(x)$, a un número infinito de árboles en un huerto frutal infinito. Por lo tanto, en el caso de $x < x_c$, el foco de la enfermedad, introducido por casualidad en el huerto, será localizado cerca del lugar donde fue a parar, mientras que en el caso de $x > x_c$, la enfermedad puede difundirse por todo el huerto frutal.

Para dar recomendaciones prácticas es necesario hallar el valor de x_c e igualar a él la función $x(a)$ presentada por los especialistas. De aquí se determina la distancia a_c que es la solución de la ecuación $x(a_c) = x_c$. El foco de la enfermedad que surgió en el huerto será localizado si la distancia entre los árboles es superior a a_c, y se difundirá por todo el huerto en caso contrario.

El problema de hallar x_c, enunciado anteriormente, se denomina, en la teoria de percolación, *problema de los enlaces*, debido a que los elementos arbitrarios aqui son los *enlaces* que, con una probabilidad dada, pueden ser integros o estar rotos. A primera vista el problema de los enlaces se parece al de los nudos que hemos examinado en los capitulos anteriores. Pero para un retículo dado, tales problemas no se reducen uno a otro y tienen diversas soluciones.

En éste y los siguientes capitulos será necesario complicar algo las designaciones. Denotemos por x_{nud} el umbral de percolación del problema de los nudos, y por x_{en}, el umbral de percolación del problema de los enlaces. Dichos umbrales dependen del tipo de retículo. Adoptemos las siguientes designaciones abreviadas para denominar los retículos planos: C, cuadrado; T, triangular; H, hexagonal. Entonces x_{nud}(H) denotará el umbral de percolación del problema de los nudos en un retículo hexagonal, x_{en}(T), el umbral de percolación del problema de los enlaces en un retículo triangular, etc. La función $P^{en}(x)$, introducida en este apartado para el problema de los enlaces, ha de distinguirse de la función $P(x)$ determinada anteriormente para el problema de los nudos.

El problema de los enlaces puede ser enunciado no sólo en el lenguaje de los racimos, sino también como el problema de percolación desde un lado del cuadrado hacia otro. Recordemos el experimento de la rejilla pantalla, con el que hemos iniciado este libro. Es posible que a algunos lectores les haya surgido la pregunta de por qué fue necesario bloquear los nudos, es decir, cortar de repente cuatro alambres que entraban en cada nudo, en vez de cortar de uno en uno los alambres (enlaces) elegidos arbitrariamente. Es fácil entender que, cortando los enlaces, los investigadores determinarian el umbral x_{en}(C) en vez del umbral x_{nud}(C) que había sido hallado en el experimento. Ahora se puede explicar por qué fue elegido el problema de los nudos: como será mostrado más adelante, el problema de los enlaces en un retículo cuadrado tiene una solución analítica exacta, de la cual se deduce, que $x_{en}(C) = 0,5$. Es por eso que para determinar x_{en}(C) no tenía sentido realizar un experimento tan complejo, mientras que x_{nud}(C) sólo se determina a partir de cálculos aproximados.

EJERCICIO

1. Averigüen la función $P^{en}(x)$ cuando $1 - x \ll 1$ para los tres retículos representados en la figura 16.

Al examinar el problema de los nudos, en vez de la función $P(x)$ a menudo se introduce la función $P^{nud}(x)$ enlazada con $P(x)$ mediante la relación

$$P(x) = xP^{nud}(x). \quad (1)$$

Por definición, $P(x)$ es la probabilidad de que un nudo elegido al azar pertenezca a un racimo infinito. Esta función puede ser representada como el producto de las probabilidades de dos acontecimientos independientes. El primero de ellos, en el lenguaje del problema de la sustancia ferromagnética, consiste en que el nudo elegido al azar resultó magnético. La probabilidad de tal acontecimiento es igual a x (véase el ejercicio 1 del capítulo 1). El segundo acontecimiento consiste en que dicho nudo está relacionado con un racimo infinito de nudos magnéticos. Por lo tanto, la función $P^{nud}(x)$ determinada por la fórmula (1), es la probabilidad de que el nudo magnético elegido al azar esté relacionado con el racimo infinito. Con otras palabras, $P^{nud}(x)$ es la porción de nudos *magnéticos* pertenecientes al racimo infinito, es decir, la relación entre el número de nudos pertenecen al racimo infinito y el número de nudos magnéticos. Recordemos que $P(x)$ es la relación entre el número de nudos pertenecientes al racimo infinito y el número total de nudos. Es natural que la función $P^{nud}(x)$ crece monótonamente con el aumento de x, equivale a la unidad cuando $x = 1$, y es igual a cero cuando $x \leqslant x_{nud}$.

El matemático inglés J. M. Hammersley, quien fue el primero en hablar de la teoría de percolación, demostró un teorema según el cual

$$P^{nud}(x) \leqslant P^{en}(x). \quad (2)$$

Ambas funciones P^{nud} y P^{en} crecen monótonamente al aumentar el argumento x. Por esta razón (fig. 18), de la fórmula (2) se deduce que

$$x_{en} \leqslant x_{nud}, \quad (3)$$

es decir, para cualquier retículo (no plano obligatoriamente), el valor del umbral para el problema de los enlaces no es mayor que para el problema de los nudos. Este resultado puede ser escrito en forma de otra desigualdad:

$$1 - x_{en} \geqslant 1 - x_{nud}, \quad (4)$$

y puede ser interpretado del modo siguiente. Supongamos que es preciso bloquear la percolación de corriente eléctrica por una

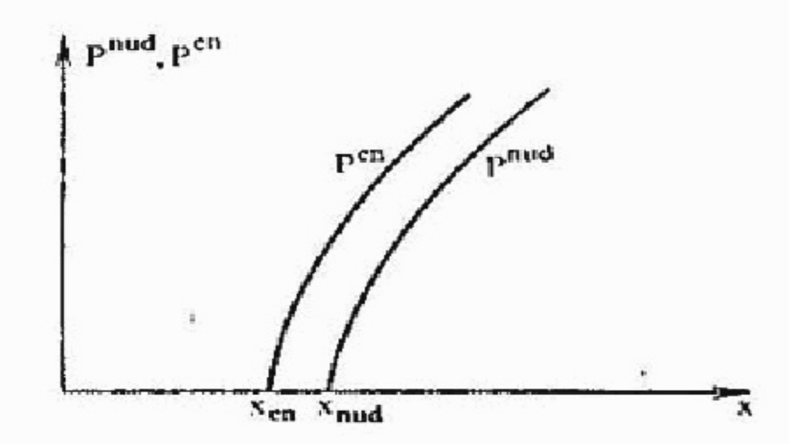


Fig. 18.

rejilla de conductores, o la percolación de un liquido por una rejilla de tubos, lo cual se puede hacer bloqueando los nudos, o cortando los enlaces (alambres o tubos) que unen dichos nudos. La desigualdad (4) significa que cortando los nudos es más fácil bloquear el sistema que cortando los enlaces. La porción de nudos bloqueados, con los que se interrumpe la corriente, es menor que la porción de enlaces rotos. Tal resultado nos parece natural en absoluto, ya que, al ser bloqueado un nudo, se rompe no sólo un enlace, sino que todos los enlaces que entran en ese nudo.

EJERCICIO

2. Hallen la función $P^{nud}(x)$ cuando $1 - x \ll 1$ para los tres retículos representados en la figura 16. Compárenla con el resultado del ejercicio 1 y comprueben la justedad de la desigualdad (2).

Aclaración. En el ejercicio 1 del capítulo 3 habíamos recomendado hallar la función $P(x)$ para el problema de los nudos cuando $1 - x \ll 1$. Pero aquí solamente se trataba del principal término de la función, es decir, de $P(x) = x$. Si sustituimos esta expresión en la fórmula (1), obtenemos $P^{nud} = 1$. Es el resultado correcto en el sentido de que $\lim_{x \to 1} P^{nud}(x) = 1$. Ahora proponemos al lector hallar los pequeños términos que distinguen la función $P^{nud}(x)$ de la unidad. Por supuesto que el límite de los mismos, cuando $x \to 1$, es igual a cero. Por eso el resultado puede ser presentado en forma de $P^{nud}(x) = 1 - A(1 - x)^n$, donde A y n son los coeficientes numéricos positivos determinados por el tipo de retículo.

RETÍCULOS RECUBRIDORES Y CONTENEDORES

El problema de los nudos es más general que el problema de los enlaces. Este último se reduce al problema de los nudos pero en

otro retículo llamado *recubridor*. Éste se construye a base del retículo inicial según las siguientes reglas:

1. En el centro de cada enlace del retículo inicial hay que colocar un nudo del retículo recubridor.

2. Dos nudos del retículo recubridor han de enlazarse uno con otro en caso y sólo en caso de que los enlaces del retículo inicial, en los que están colocados esos dos nudos, converjan en el nudo de este último retículo.

El resultado de tal construcción es un nuevo retículo periódico denominado retículo recubridor respecto al retículo inicial.

La figura 19 ilustra un retículo recubridor para el caso cuando el retículo inicial es un retículo cuadrado. Este último está representado con líneas finas. Los arcos indican los lugares donde el retículo inicial tiene nudos. El retículo recubridor consta de líneas finas y líneas gruesas, pero en las intersecciones de las líneas finas ese retículo no tiene nudos. Éstos sólo se encuentran en las intersecciones de las líneas gruesas, y en la figura están marcados con puntos.

Cada enlace del retículo inicial se acopla con otros tres enlaces en uno de sus extremos, y con tres enlaces más en el otro extremo. Por eso cada nudo de ese retículo debe estar enlazado con otros seis nudos. Esto se muestra en la figura 19. Cada nudo está enlazado con otros cuatro nudos mediante líneas gruesas, y con dos nudos más, mediante líneas finas.

Ahora supongamos que el problema de los enlaces ha sido enunciado con arreglo al retículo inicial, es decir, cierta porción de enlaces elegidos al azar están rotos.

Supongamos que si un enlace del retículo inicial está roto, el nudo del retículo recubridor situado en dicho enlace ha de permanecer bloqueado. Ahora surgió el problema de los nudos en

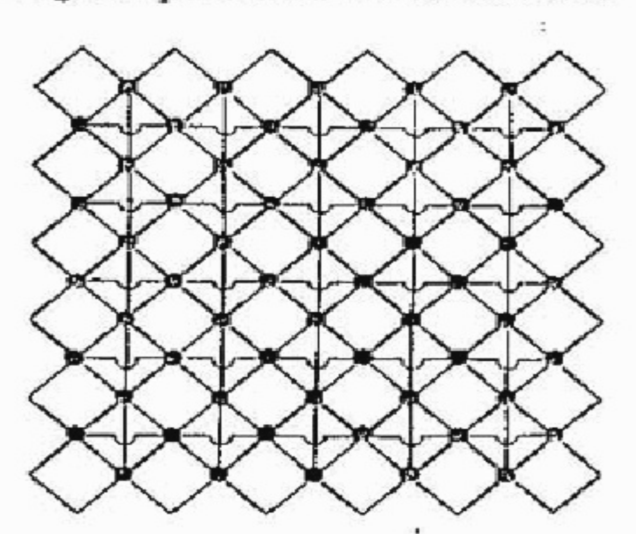


Fig. 19. Retículo para cubrir la red cuadrada.

un retículo recubridor. Los mismos en tal retículo resultaron bloqueados casualmente, y la porción de ellos equivale a la porción de enlaces rotos en el retículo inicial.

Cabe señalar que en el problema de los enlaces, la existencia de un racimo infinito de nudos enlazados uno con otro siempre significa la existencia de un racimo infinito de enlaces íntegros acoplados uno con otro. Y, por el contrario, la falta de un racimo infinito de nudos significa la falta de un racimo de enlaces.

Según la estructura del retículo recubridor, se ve que la existencia de un racimo infinito de enlaces enteros en el retículo inicial, significa la existencia de un racimo infinito de nudos no bloqueados en el retículo recubridor y, por el contrario, la falta de un racimo infinito de enlaces en el retículo inicial, significa la falta de un racimo infinito de nudos en el retículo recubridor. De aquí se deduce que el umbral de percolación del problema de los enlaces en un retículo inicial es igual al umbral de percolación del problema de los nudos en un retículo recubridor. Si designamos por L el retículo inicial, y por L_T, el retículo recubridor, lo dicho puede ser escrito en forma de la fórmula

$$x_{en}(L) = x_{nud}(L_T). \qquad (5)$$

Una serie de desigualdades entre los umbrales de percolación para distintos retículos se puede obtener utilizando el concepto de retículo *contenedor*. Supongamos que el retículo L se obtiene del retículo L_{con} tachando cierta cantidad de enlaces. Entonces dicen que el *retículo* L_{con} *contiene el retículo* L.

Recurramos, por ejemplo, a un retículo triangular. Si eliminamos en él todos los enlaces marcados (en la figura 20) con dos rayas, el mismo se transformará en el retículo mostrado en la parte derecha de la figura. Es fácil notar que, desde el punto de vista del problema de los nudos o de los enlaces, ese nuevo retículo es equivalente a un retículo cuadrado. En efecto, el hecho de que

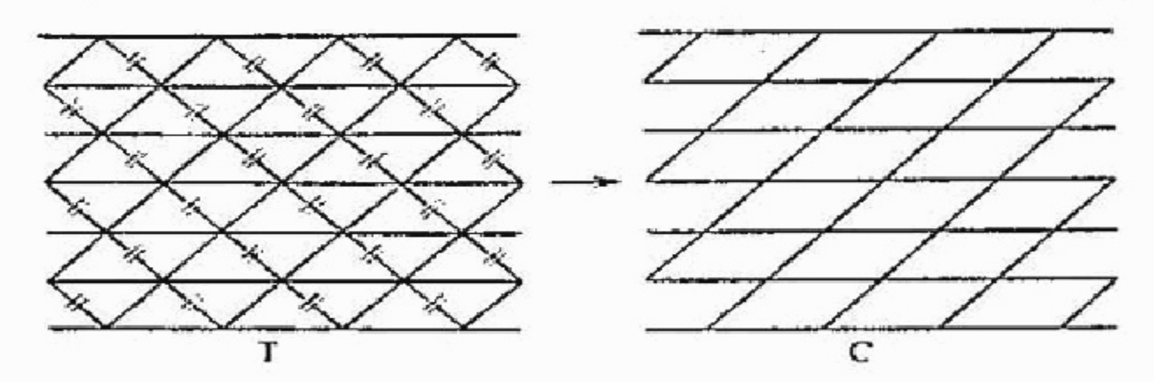


Fig. 20. El retículo triangular contiene el cuadrado.

los ángulos entre los enlaces en el nuevo retículo no sean iguales a 90°, no tiene ninguna importancia si se examina la cuestión del enlace de varios nudos uno con otro (el nuevo retículo puede ser simplemente "enderezado" mentalmente). El umbral de percolación del problema de los enlaces (¡y el de los nudos!) en este retículo equivale exactamente al umbral de percolación en un retículo cuadrado. Por eso dicen que el retículo triangular incluye en sí el retículo cuadrado.

Ahora supongamos que cierta porción de enlaces del retículo contenedor están rotos. Los enlaces de dicho retículo pueden ser divididos en enlaces que son comunes para este último y para el retículo contenido en él, y los enlaces que son específicos para el retículo contenedor (estos últimos están marcados con dos rayitas en la parte izquierda de la figura 20). En vista de que los enlaces se rompen absolutamente por casualidad, la porción de enlaces rotos en una y otra categoría de enlaces será idéntica e igual a la cantidad total de enlaces rotos en todo el retículo. Por esta razón, para obtener el retículo contenido, con la misma porción de enlaces rotos, es necesario romper complementariamente, en el retículo contenedor, los enlaces que aún permanecen íntegros, pero que son específicos para este retículo, es decir, que faltan en absoluto en el retículo contenido.

De aquí se deduce que el número de enlaces enteros que salen de cada nudo del retículo contenedor no es menor (mayor o igual) que el número de enlaces enteros que salen del mismo nudo del retículo contenido. Por eso la probabilidad de que un nudo elegido al azar pertenezca a un racimo infinito para un retículo contenedor, no es menor que para un retículo contenido. Así hemos obtenido la desigualdad

$$P_{L}^{en}(x) \leqslant P_{L_{con}}^{en}(x). \qquad (6)$$

En el primer miembro de la desigualdad (6) se encuentra la función $P^{en}(x)$ calculada para el retículo contenido, y en el segundo miembro, para el retículo contenedor. Al igual que de la desigualdad (2) se deduce la desigualdad (3), de la (6) se deduce que

$$x_{en}(L_{con}) \leqslant x_{en}(L), \qquad (7)$$

es decir, x_{en} es menor en el retículo contenedor que en el contenido.

Como ya fue dicho, el retículo triangular contiene el retículo cuadrado. Por lo tanto,

$$x_{en}(\mathrm{T}) \leqslant x_{en}(\mathrm{C}). \qquad (8)$$

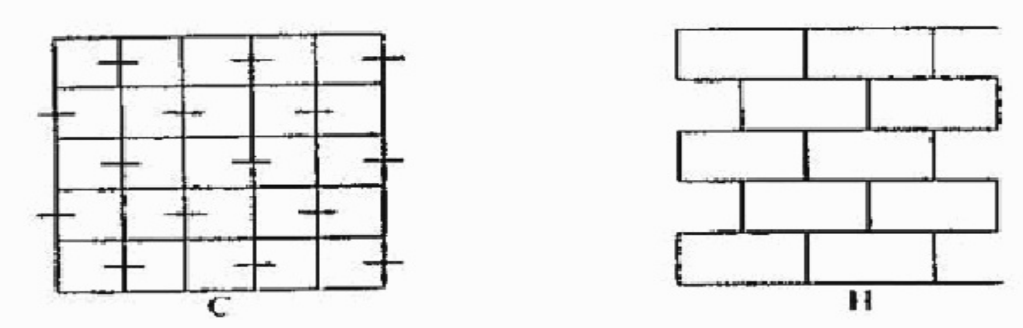


Fig. 21. El retículo cuadrado contiene el hexagonal.

Ahora supongamos que del retículo cuadrado han sido tachados ciertos enlaces, así como se muestra en la figura 21. En este caso obtendremos el retículo representado en la parte derecha de la figura. Obsérvenlo con atención. Es equivalente a un retículo hexagonal. Estirémoslo suavemente hacia arriba, deformando un poco los enlaces, y sus células (fig. 22) se convertirán en una especie de "panales de miel", como los mostrados en la figura 16. Por consiguiente, el retículo cuadrado *contiene* el retículo hexagonal y, por lo tanto,

$$x_{en}(C) \leqslant x_{en}(H). \tag{9}$$

De las desigualdades (8) y (9) se deduce que

$$x_{en}(T) \leqslant x_{en}(H). \tag{10}$$

Ahora volvamos al problema de los nudos. Supongamos que en los retículos contenedor y contenido están bloqueados los mismos nudos (respectivamente la porción de nudos bloqueados aquí y allá es igual). Admitamos que en el retículo contenido existe un racimo infinito de nudos enteros. Eso significa que el mismo también existe en el retículo contenedor, ya que los enlaces adicionales sólo pueden contribuir a su aparición. Pero si se sabe que el racimo infinito existe con una porción dada de nudos enteros en el retículo contenedor, de aquí es imposible deducir algo



Fig. 22. Transformación de la célula representada en la parte derecha de la figura 21, en "panales de miel".

acerca de la existencia de un racimo infinito en el retículo contenido. La eliminación de una serie de enlaces entre los nudos al pasar de un retículo contenedor a uno contenido, puede ser fatal para el racimo infinito. Por lo tanto, el umbral de percolación del problema de los nudos en un retículo contenido no puede ser menor que en un retículo contenedor:

$$x_{\text{nud}}(L_{\text{con}}) \leqslant x_{\text{nud}}(L). \tag{11}$$

De aquí se deduce una cadena de desigualdades para los retículos cuadrado, triangular y hexagonal:

$$x_{\text{nud}}(\text{T}) \leqslant x_{\text{nud}}(\text{C}) \leqslant x_{\text{nud}}(\text{H}), \tag{12}$$

exactamente la misma que para el problema de los enlaces.

Volvamos otra vez a la figura 19, donde se muestra el retículo recubridor de un retículo cuadrado. Supongamos que los enlaces representados con líneas finas han sido eliminados. Es fácil entender que como resultado hemos obtenido un retículo cuadrado solamente que virado a 45°, lo cual, por supuesto, no tiene completamente importancia para los problemas de la teoría de percolación.

Así pues, el retículo recubridor de un retículo cuadrado incluye en sí este último. De acuerdo con la fórmula (5),

$$x_{\text{nud}}(L_{\text{r}}) = x_{\text{en}}(\text{C}), \tag{13}$$

donde por L_{r} se entiende el retículo recubridor representado en la figura 19. Pero de la desigualdad (11) y del hecho de que ese retículo contiene el retículo cuadrado, se deduce que

$$x_{\text{nud}}(L_{\text{r}}) \leqslant x_{\text{nud}}(\text{C}). \tag{14}$$

De las desigualdades (13) y (14) resulta que

$$x_{\text{nud}}(\text{C}) \leqslant x_{\text{nud}}(\text{C}). \tag{15}$$

Por consiguiente, hemos obtenido que para un retículo cuadrado, el umbral del problema de los enlaces es inferior al umbral del problema de los nudos. La desigualdad (15) es un caso particular del teorema general de J. M. Hammersley, el cual se expresa por medio de la fórmula (3) y que fue expuesto por nosotros sin demostración. Al deducir (15) no hemos utilizado este teorema, y por eso podemos decir que las ideas antes presentadas demuestran el mismo para el caso de un retículo cuadrado.

Enfoquemos ahora el problema de los enlaces desde un punto de vista algo diferente. Hasta ahora habiamos dicho que existen enlaces enteros y rotos distribuidos arbitrariamente por el reticulo, y que se llamaba racimo el conjunto de nudos unidos por medio de enlaces enteros.

El problema puede ser enunciado más simétricamente. A los enlaces rotos llamarémoslos "enlaces negros", y los enteros, "enlaces blancos". Diremos que el conjunto de nudos unidos mediante enlaces blancos es un racimo blanco, y que el conjunto de nudos unidos mediante enlaces negros es un racimo negro (según la vieja terminologia, por racimo se entendia un racimo "blanco"). Al igual que antes, por x designaremos la porción de enlaces blancos, y por q, la porción de enlaces negros. Como cada enlace es negro o blanco, $q = 1 - x$.

Con arreglo a tal enunciación también se puede hablar de la percolación por los enlaces blancos, y de la percolación por los enlaces negros.

Con poca concentración x de enlaces blancos, no existe racimo blanco infinito, pero sí existe racimo negro infinito, es decir, un racimo infinito de nudos unidos por medio de enlaces negros. Por el contrario, con poca concentración q de enlaces negros (es decir, con valores de x próximos a la unidad) existe un racimo blanco infinito y no hay racimo negro infinito.

Cuando x varía de cero a la unidad, ocurren dos acontecimientos: desaparece el racimo infinito negro y aparece el blanco o, que viene a ser lo mismo, desaparece la percolación por los enlaces negros, y aparece la percolación por los enlaces blancos. Pero, ¿en qué orden suceden esos acontecimientos?

Los enlaces blancos y negros no difieren en nada uno de otro, salvo sus nombres. Por eso es evidente que la concentración crítica q_{en} con la que surge percolación por los enlaces negros, es igual a la concentración x_{en} con la que surge percolación por los enlaces blancos.

Por consiguiente, al aumentar x, la percolación por los enlaces blancos surge cuando $x = x_{en}$, y la percolación por los enlaces negros desaparece cuando $x = 1 - q_{en} = 1 - x_{en}$. La sucesión con que ocurren estos acontecimientos depende del signo de la diferencia $x_{en} - 0{,}5$.

Si para realizar la percolación por los enlaces blancos es necesario que más de la mitad de los enlaces sean blancos (lo cual significa que en el punto de percolación debe haber más enlaces blancos que negros), entonces, al aumentar x, al principio

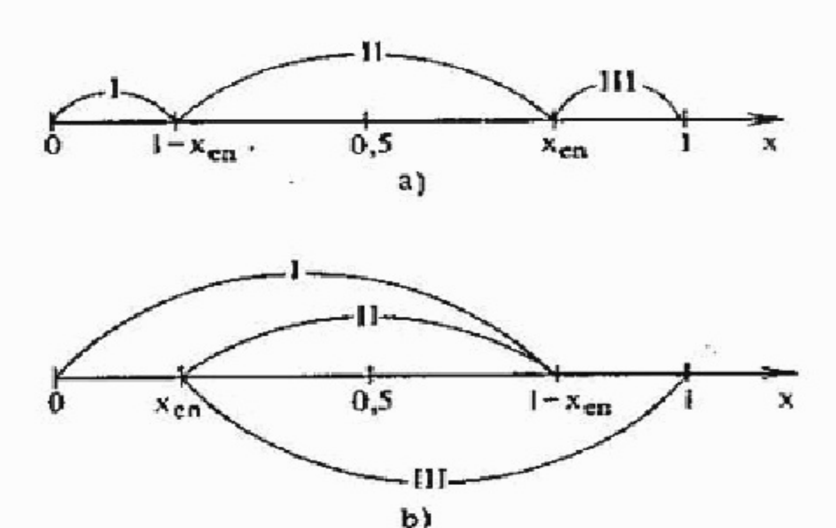


Fig. 23.

desaparece la percolación por los enlaces negros, y después aparece la percolación por los enlaces blancos (fig. 23, *a*). En la zona *I* de la figura 23, *a* existe percolación sólo por los enlaces negros, en la zona *III*, sólo por los enlaces blancos, y en la zona *II* no hay percolación tanto por unos como por otros enlaces.

Si $x_{en} < 0,5$, al principio aparece percolación por los enlaces blancos, y sólo después desaparece la percolación por los enlaces negros. En la zona *I* de la figura 23, *b* existe percolación por los enlaces negros, en la zona *III*, por los enlaces blancos, y en la zona *II*, tanto por unos como por otros enlaces.

Esa misma enunciación simétrica es aplicable para el problema de los nudos. Recordemos que en este caso todos los enlaces son enteros, pero los nudos suelen ser de dos categorías. En el problema del retículo, los enlaces se llamaban enteros y bloqueados, mientras que en el problema de la sustancia ferromagnética, los mismos se denominaban magnéticos y no magnéticos. Ahora, al igual que en el problema de los enlaces, se introduce una designación universal: los nudos enteros o magnéticos se denominan nudos blancos, y los nudos bloqueados o no magnéticos se llaman nudos negros. Los nudos blancos se llaman nudos enlazados cuando son vecinos el uno del otro o cuando permanecen unidos mediante una cadena de nudos blancos que son vecinos próximos. Igualmente pueden estar enlazados entre sí los nudos negros.

Se puede hablar de la percolación por los nudos blancos y por los nudos negros. Si $x_{nud} > 0,5$, existirá un campo de valores de x en el que no habrá percolación ni por los nudos blancos ni por los negros ($1 - x_{nud} < x < x_{nud}$). Si $x_{nud} < 0,5$, en la zona $x_{nud} < x < 1 - x_{nud}$ existirá percolación tanto por los nudos blancos como por los negros.

El enfoque simétrico resulta constructivo, ya que a veces, examinando el retículo, se logra aclarar que en éste no puede haber ni percolación blanca ni percolación negra, o que en el mismo debe haber sin falta una de esas percolaciones. Partiendo de ello es fácil sacar ciertas conclusiones acerca del umbral de percolación.

Examinemos, por ejemplo, el problema de los nudos en un retículo triangular. Supongamos que hay percolación por los nudos blancos. Es fácil convencerse de que en este caso no puede haber percolación por los nudos negros. Supongamos que se estudia la percolación de la corriente eléctrica de izquierda a derecha en una rejilla de gran tamaño, así como se hacía en el experimento descrito en las primeras páginas de este libro. Sólo que ahora la rejilla, en vez de ser cuadrada, está confeccionada en forma de un retículo triangular. Es fácil comprender que dicho retículo está estructurado de tal modo que la presencia de una vía de percolación por los nudos blancos de izquierda a derecha excluye la posibilidad de percolación por los nudos negros de arriba abajo. En efecto, los nudos negros no pueden "penetrar" a través de la línea quebrada que atraviesa toda la rejilla de izquierda a derecha y que une los nudos blancos.

Como fue explicado en el capítulo 3, la existencia de un racimo infinito asegura la percolación en cualquier dirección si el tamaño del sistema es bastante grande. Por eso es preciso deducir que en un retículo triangular, con un mismo valor de x, no puede existir racimo infinito tanto de nudos blancos como de nudos negros, es decir, no puede haber percolación tanto por los nudos blancos como por los negros. De aquí resulta que

$$x_{nud}(T) \geqslant 0{,}5.$$

Eso mismo se puede deducir con arreglo a un retículo cuadrado: $x_{nud}(C) \geqslant 0{,}5$.

Para el retículo triangular fue demostrado un teorema según el cual $x_{nud}(T) = 0{,}5$. Aquí no podemos exponer su demostración, pero la esencia del asunto se puede entender con relativa facilidad utilizando la idea acerca de la percolación blanca y la percolación negra. Representando distintas configuraciones de nudos negros y blancos es posible demostrar que la falta de percolación por los nudos blancos de izquierda a derecha *provoca* obligatoriamente la percolación por los nudos negros de arriba abajo (¡el retículo cuadrado no posee tal propiedad!).

Así pues, en un retículo triangular *no puede haber percolación ni por los nudos blancos ni por los negros simultáneamente, y no puede no haber percolación aunque sea por una categoría de nudos.* De aquí se deduce que la zona *II* en la figura 23 (en esta figura ahora es

preciso sustituir x_{en} por x_{nud}) se reduce a un punto, es decir, $x_{nud}(T) = 0{,}5$.

En el caso del problema de los enlaces es conveniente realizar tal tipo de investigación utilizando el concepto de retículo dual.

RETÍCULOS DUALES

Duales sólo pueden ser los retículos planos. Por planos se entienden los retículos que pueden ser ubicados en una superficie, además, de tal modo que los enlaces del retículo sólo se crucen en los puntos donde se encuentran los nudos del retículo. Por ejemplo, todos los retículos representados en la figura 16 son planos, mientras que el retículo recubridor en la figura 19 no es plano, ya que en los lugares marcados con arcos, sus enlaces se cruzan y no hay nudos en los puntos de intersección. (Los arcos son una especie de puentes que aseguran la desunión de las vías dirigidas de izquierda a derecha y de arriba abajo.)

Cada retículo plano divide la superficie en células. El retículo L^d será dual respecto al retículo L en caso de que cada enlace L^d cruce uno y solamente uno de los enlaces del retículo L y, viceversa, en caso de que cada enlace L cruce uno y solamente uno de los enlaces L^d.

Además, en cada célula del retículo L debe encontrarse tan sólo un nudo del retículo L^d (y viceversa).

Como se deduce de la definición, la propiedad de dualidad es recíproca: si L^d es dual respecto a L, también L es dual respecto a L^d. Las figuras 24 y 25 ilustran que un retículo cuadrado es dual

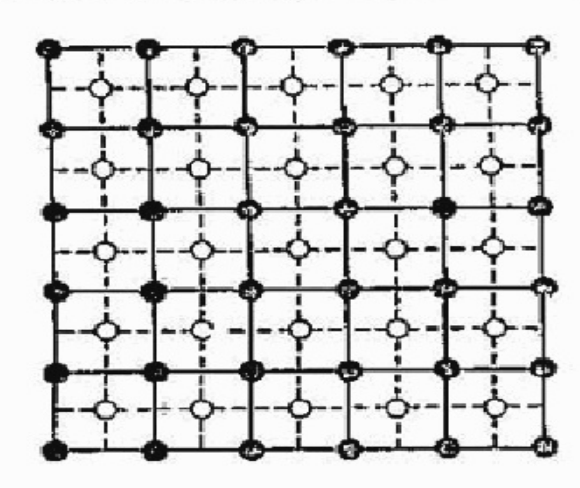


Fig. 24. Estructura que muestra que el retículo cuadrado es dual a sí mismo. Las líneas llenas y los círculos oscuros indican los enlaces y los nudos del retículo inicial, mientras que las líneas de trazos y los círculos claros indican los enlaces y los nudos del retículo dual.

a sí mismo, y que los retículos triangular y hexagonal son duales uno respecto a otro.

Volvamos ahora al problema de los enlaces. Supongamos que si cierto enlace en el retículo inicial es blanco (entero), el enlace que lo corta en el retículo dual será negro (roto). Por esta razón, si la concentración de enlaces blancos en el retículo inicial es igual a x, la concentración de enlaces blancos en el retículo dual $q = 1 - x$.

Más adelante será necesario hablar del umbral de percolación como del valor de la concentración de enlaces blancos con el que surge (o desaparece) por primera vez la conductibilidad de izquierda a derecha en un retículo muy grande con electrodos soldados a él (véase la fig. 1). Es el mismo planteamiento del problema examinado al principio del libro, solamente que ahora son alterados no los nudos del retículo, sino los enlaces.

Admitamos que en el retículo inicial existe una vía de percolación por los enlaces blancos de izquierda a derecha. Como es fácil de entender, eso significa la falta de vía de percolación por los enlaces blancos en el retículo dual de arriba abajo. En efecto, el enlace blanco del retículo inicial, según la definición, sólo es cortado por el enlace negro del retículo dual. Por consiguiente, si en el retículo inicial existe una línea quebrada de enlaces blancos, la cual no se interrumpe en ninguna parte, cruzando todo el retículo de izquierda a derecha, esto significa que los enlaces blancos del retículo dual no pueden "abrirse paso" en ningún lugar de dicho retículo para pasar de arriba abajo.

Si el retículo es bastante grande, la presencia de una vía dirigida de izquierda a derecha en el retículo inicial, significa que la

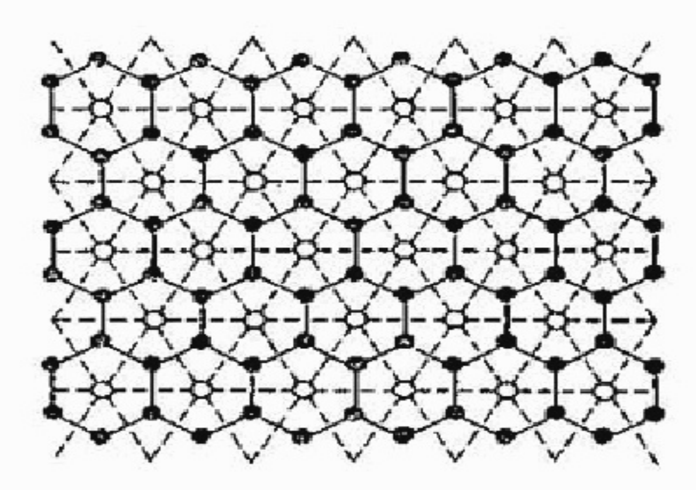


Fig. 25. Construcción que muestra que el retículo triangular es dual al hexagonal (y viceversa). Las designaciones son las mismas que en la figura 24.

porción de enlaces blancos es mayor que la porción de enlaces de umbral:

$$x > x_{en}(L). \tag{16}$$

Pero la falta de una vía dirigida de arriba abajo en los enlaces duales blancos, significa que la porción de éstos en el retículo dual, $q = 1 - x$, es menor que la porción de enlaces de umbral en ese retículo, es decir, $1 - x < x_{en}(L^d)$, o bien

$$x > 1 - x_{en}(L^d). \tag{17}$$

De acuerdo con lo dicho más arriba, todos los valores de x que satisfagan la desigualdad (16), satisfarán también la desigualdad (17). De aquí se deduce que $x_{en}(L) \geqslant 1 - x_{en}(L^d)$, o bien

$$x_{en}(L) + x_{en}(L^d) \geqslant 1. \tag{18}$$

Para un retículo cuadrado $L = L^d$, y de la desigualdad (18) se deduce que

$$x_{en}(C) \geqslant 0,5. \tag{19}$$

y si utilizamos también la desigualdad (15), obtenemos

$$x_{nud}(C) \geqslant 0,5, \tag{20}$$

es decir, la misma conclusión que en el apartado anterior. Recuerden que el experimento del retículo cuadrado, descrito en el capítulo 1, proporcionó el valor de $x_{nud}(C) = 0,59$, lo cual no contradice la desigualdad (20).

Para dos retículos, cuadrado y triangular, ha sido estrictamente demostrado que el signo de desigualdad en la fórmula (18) debe sustituirse por el signo de igualdad, es decir,

$$x_{en}(L) + x_{en}(L^d) = 1. \tag{21}$$

De aquí seguidamente se obtienen dos nuevos resultados:

$$x_{en}(C) = 0,5 \tag{22}$$

y

$$x_{en}(T) + x_{en}(H) = 1. \tag{23}$$

Aquí no se expone la demostración estricta de la fórmula (21): la misma requiere la introducción de una serie de conceptos nuevos que en adelante no serán necesarios. Pero a esta fórmula se le puede dar una interpretación bastante clara. Dibujando diversas configuraciones de enlaces blancos y negros, se puede demostrar que para los retículos cuadrados y triangulares, la falta de percolación por los enlaces blancos de izquierda a derecha en el retículo inicial,

siempre significa la presencia de percolación de arriba abajo por los enlaces blancos del retículo dual. Creamos de buena fe en esta afirmación. Supongamos que la cantidad de enlaces blancos es tal que en el retículo inicial no hay percolación de izquierda a derecha. Para un retículo de tamaño bastante grande eso significa que

$$x < x_{en}(L). \tag{24}$$

En este caso, en el retículo dual hay percolación de arriba abajo. La porción de enlaces blancos en el mismo es igual a $1 - x$. Por consiguiente, $1 - x > x_{en}(L^d)$, o bien

$$x < 1 - x_{en}(L^d). \tag{25}$$

Conforme a lo dicho más arriba, todos los valores de x que satisfacen la desigualdad (24), también deben satisfacer la desigualdad (25). Esto es posible si $1 - x_{en}(L^d) \geqslant x_{en}(L)$, o si

$$x_{en}(L) + x_{en}(L^d) \leqslant 1. \tag{26}$$

De las desigualdades (18) y (26) se deduce la igualdad (21).

La fórmula (23) no permite hallar por separado $x_{en}(T)$ y $x_{en}(H)$. No obstante, utilizando la transformación "estrella–triángulo", conocida en la teoría de los circuitos eléctricos, podemos obtener una relación más, la cual enlaza los umbrales de percolación del problema de los enlaces en los retículos triangular y hexagonal. Como resultado, se hace evidente cada uno de los umbrales:

$$\begin{aligned} x_{en}(T) &= 2\,\text{sen}\,(\pi/18) \approx 0{,}347296, \\ x_{en}(H) &= 1 - x_{en}(T) = 1 - 2\,\text{sen}\,(\pi/18) \approx 0{,}652704. \end{aligned} \tag{27}$$

EJERCICIO

3. Observen la figura 57 que ilustra la transformación "estrella–triángulo". Si Uds. son capaces de comprender cómo se escribe la relación acerca de la cual acabamos de hablar y obtienen las fórmulas (27), ¡eso será magnífico! Si no pueden lograrlo, no se disgusten, pues este problema no es fácil. La deducción de las fórmulas (27), efectuada por primera vez en el año 1963 por M. F. Sykes y J. W. Essam, matemáticos ingleses, fue un acontecimiento en la teoría de percolación. Lean con atención el texto adjunto a dicha figura y Uds. posiblemente experimenten placer por la brillante aplicación de la teoría de las probabilidades, que condujo a un resultado tan interesante.

Sólo nos queda presentar la tabla general de los umbrales de percolación para los retículos planos (tabla 1).

Tabla 1

Tipo de retículo	x_{en}	x_{nud}
Triangular	0,3473	0,5
Cuadrado	0,5	0,59
Hexagonal	0,6527	0,70

Sólo dos números en esta tabla, a saber, $x_{nud}(C)$ y $x_{nud}(H)$, fueron obtenidos por métodos aproximados. Todos los demás son los resultados de soluciones exactas. Como será mostrado en el capítulo siguiente, en cuanto a los retículos tridimensionales (volumétricos) el asunto es mucho peor. Para éstos no se ha obtenido ni una sola solución exacta. Y eso no debe parecer extraño. Para la solución analítica de los problemas de la teoría de percolación no existe ningún método. Cada solución exacta – de una de ellas ya hemos hablado – produce el efecto de milagro. Por eso, a nuestro juicio debería parecer más extraño el hecho de que ya son tantas las soluciones exactas obtenidas.

EJERCICIO

4. Volvamos al huerto frutal del que se habló al comenzar este capítulo. Supongamos que la distancia entre los árboles se elige de la condición de que la cantidad de pares enlazados es igual al valor de umbral. Admitamos que conocemos la función $a(x)$, es decir, la distancia entre los árboles inmediatos según la cantidad de pares enlazados x. Naturalmente que cuanto mayor sea x tanto menor será la distancia a, ya que cuanto más cerca crezcan los árboles uno de otro, tanto más fácilmente se producirá el contagio entre ellos. Si $x = x_{en}$, la distancia entre los árboles será igual a $a(x_{en})$. Hallen la superficie de terreno que corresponde a cada árbol, con tal elección de la distancia y para tres retículos diferentes. El retículo con la menor superficie por árbol es el más conveniente. ¿Es posible decir qué retículo contribuye a la menor superficie por árbol, basándose tan sólo en el hecho de que la función $a(x)$ disminuye monótonamente con el aumento de x?

PERCOLACIÓN ORIENTADA

Ahora supongamos que en los nudos de un retículo plano hemos plantado no un huerto frutal, sino un bosque, y que éste se incendió. Las ramas de algunos árboles que son vecinos próximos se hallan entrelazadas y transmiten el fuego de un árbol a otro. Conforme a la terminología general, diremos que los nudos en los que se encuentran tales árboles permanecen unidos por medio de enlaces blancos. Otros árboles que también son vecinos próximos no incendian uno a otro. En este caso diremos que los referidos nudos permanecen unidos por medio de enlaces negros. Los enlaces blancos y negros se hallan desordenadamente dispersos por el retículo, además, una parte de los enlaces blancos es igual a x.

El problema consiste en hallar tal valor crítico de x_{cn}, con el que, cuando $x < x_{cn}$, el foco del incendio sea localizado, y con el que, cuando $x > x_{cn}$, el fuego se propague por todo el bosque.

Es fácil entender que eso es simplemente un ejemplo más del problema de los enlaces. El valor de x_{cn} puede ser tomado de la tabla 1.

Ahora supongamos que durante el incendio sopla un viento muy fuerte, de tal modo que el fuego se propaga tan sólo en dirección de éste. Eso conduce a un nuevo problema interesante denominado problema de *percolación orientada (o dirigida).*

Consideraremos que el bosque ha sido plantado en los nudos de un retículo cuadrado, y que el viento sopla en dirección de la diagonal de los cuadrados. En la figura 26, la dirección del viento se muestra mediante una saeta, y el retículo está virado a 45° respecto al método corriente de su presentación. Las condiciones del problema ahora se enuncian del modo siguiente. Cada enlace blanco se convierte en un vector cuya flecha se halla dispuesta de tal manera que la proyección de dicho vector sobre la dirección del viento es positiva. Al igual que antes, los enlaces negros no transmiten el fuego en ninguna dirección, mientras que los blancos lo transmiten sólo en dirección de la flecha. Es necesario determinar la porción crítica de enlaces blancos, a partir de la cual, un árbol en llamas, en un bosque infinitamente grande, puede provocar un incendio capaz de propagarse a una distancia infinitamente grande.

En la figura 26, mediante líneas gruesas con saetas se indican los enlaces blancos, y se muestran dos vías de percolación: *1* y *2*. La vía *1* puede representar el movimiento del fuego, mientras que la vía *2* no corresponde a las condiciones de percolación orientada: en dos lugares indicados con rayitas, el movimiento es opuesto a la

dirección del enlace blanco, o sea, se realiza en contra de la dirección del viento.

Por lo tanto, si en la percolación no orientada, los enlaces blancos se han utilizado en ambas direcciones, en la percolación orientada ellos pueden utilizarse en una sola dirección. De aquí resulta que la porción crítica de enlaces blancos en la percolación orientada x_{en}^{0} no puede ser menor que en la percolación ordinaria, es decir, $x_{en}^{0} \geqslant x_{en}$.

Hoy día, para una serie de problemas de percolación orientada se ha obtenido una solución aproximada. En particular, para el problema de los enlaces en un retículo cuadrado, el cual fue descrito más arriba, $x_{en}^{0} = 0{,}63$ o bien 0,64 (los resultados obtenidos por distintos métodos difieren uno de otro). Recordemos que para el problema no orientado de los enlaces en un retículo cuadrado, $x_{en} = 0{,}5$.

Muchos problemas físicos se reducen a la percolación orientada. Como ejemplo puede ser nombrado el movimiento del electrón en un intenso campo eléctrico engendrado en un medio heterogéneo arbitrario. En tal medio, donde las propiedades cambian arbitrariamente de un punto a otro, en dirección opuesta al movimiento del electrón surgen obstáculos que éste debe contornear. A su vez, el campo eléctrico homogéneo desempeña el papel de viento, el cual hace que el electrón se mueva en una sola dirección.

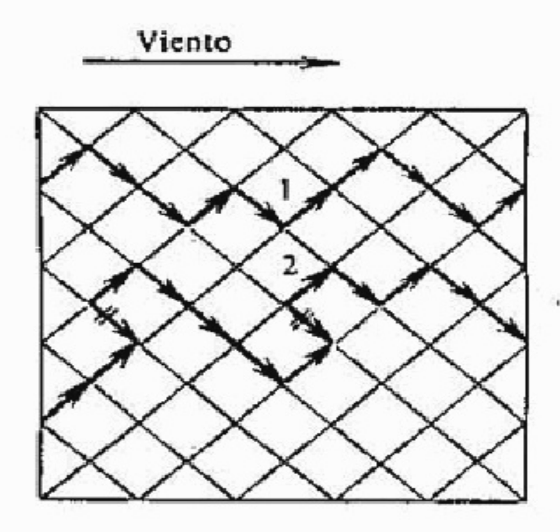


Fig. 26. Los enlaces blancos orientados se señalan mediante líneas gruesas con saetas, y los enlaces negros, mediante líneas finas. El fuego puede difundirse de izquierda a derecha por la vía *1* y no puede difundirse por la 2. Con dos rayas se indican dos tramos de la vía *2* en los que el fuego se vería obligado a moverse en contra del viento.

La percolación orientada también surge en el problema de conductibilidad de la rejilla de alambre (capítulo 1), si admitimos que en cada enlace entre los nudos de la rejilla ha sido intercalado un diodo (rectificador) que deja pasar la corriente en una sola dirección. En este caso, la porción de enlaces rotos, con la cual cesa de fluir la corriente por la rejilla, corresponde al umbral de percolación orientada. También se ha examinado un problema mixto, cuando los diodos se intercalan no en todos los enlaces de la rejilla.

Capítulo 6
RETÍCULOS TRIDIMENSIONALES Y ESTIMACIONES APROXIMADAS DE LOS UMBRALES DE PERCOLACIÓN

Como ya fue mostrado en el capítulo 5, el umbral de percolación depende considerablemente del tipo de retículo sometido a examen. El objeto del presente capítulo consiste en aclarar cualitativamente qué propiedades de los retículos son precisamente las más importantes para los umbrales de percolación. Comprendiendo esto se puede aprender, sin resolver el problema, a pronosticar (con una precisión del orden del 10%) los umbrales de percolación. Como hay gran cantidad de retículos, y el cálculo de un umbral requiere (¡además de alto nivel profesional!) alrededor de una hora de funcionamiento de un ordenador de alta clase, la habilidad de predecir enseguida el resultado (aunque no sea muy exacto) constituye un hecho muy valioso.

Además, los problemas de percolación no se reducen tan sólo a los problemas de los retículos. Como veremos más adelante, para distintas aplicaciones son importantes principalmente los problemas no relacionados con los retículos. Por consiguiente, las ideas acerca de la estimación aproximada, expuestas en este capítulo, son muy útiles para los llamados problemas no reticulares. A base de dichas ideas, una serie de umbrales de percolación, para los problemas no reticulares, fueron pronosticados con gran precisión mucho antes de la resolución de los referidos problemas con la ayuda de un ordenador.

Para adquirir la experiencia necesaria hay que salir de los márgenes de los retículos planos examinados en el capítulo anterior y recurrir a los retículos tridimensionales.

Uno de los retículos tridimensionales más simples es el retículo *cúbico sencillo* (abreviadamente CS) representado en la figura 12. Como base del mismo sirve el cubo elemental mostrado en la figura 27. Los vectores $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ se denominan *vectores de traslación*. Alargando cada uno de ellos un número entero de veces (n_1, n_2, n_3) y sumando después los vectores obtenidos, se puede hallar el vector $\vec{R}_{n1, n2, n3}$ que sale del origen de coordenadas y se apoya en cualquier nudo del retículo cúbico sencillo:

$$\vec{R}_{n1, n2, n3} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 .$$

En los retículos cúbicos, todos los vectores $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ tienen la misma longitud a, y por este motivo, los números n_1, n_2, n_3 son simplemente tres coordenadas cartesianas de los nudos del retículo, expresadas en unidades de a. Se dice que el retículo cúbico sencillo se obtiene a base de traslación (desplazamiento paralelo) de un cubo elemental en dirección de los vectores múltiplos a los vectores $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$.

La característica más importante de un retículo es el número de nudos inmediatos (éste también suele llamarse *número de coordinación*), el cual se designa por z. Para un retículo cúbico sencillo $z = 6$.

En forma de retículo cúbico sencillo se cristalizan los compuestos alcalino-halógenos, tales como NaCl (sal común), KCl (sal gema), LiF, NaI, etc. Además, los iones del metal alcalino (por ejemplo, Na^+) se alternan, en los nudos del retículo, con los iones del halógeno (por ejemplo, con Cl^-).

Retículo cúbico centrado en el espacio o en el cuerpo (*abreviadamente CCE*). Este retículo puede ser obtenido de dos retículos cúbicos sencillos trasladados uno respecto a otro a la distancia que constituye la mitad de la diagonal del cubo

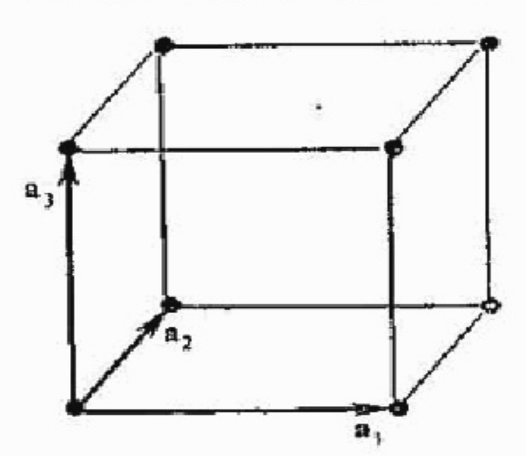
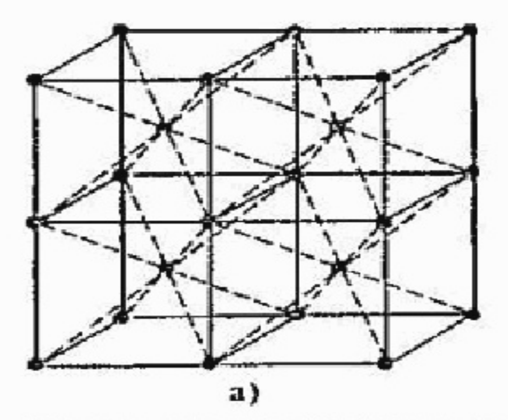


Fig. 27. Cubo elemental de un retículo cúbico sencillo.



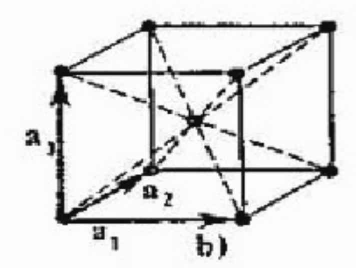


Fig. 28. *a*) Retículo cúbico centrado en el espacio; *b*) cubo elemental de un retículo cúbico centrado en el espacio.

elemental. (Llámase diagonal del cubo la línea que une los ángulos opuestos de éste y la cual pasa por el centro del mismo.)

El retículo CCE está representado en la figura 28, *a*. Como base de éste sirve el cubo elemental representado en la figura 28, *b*. El retículo CCE puede obtenerse trasladándolo en dirección de los vectores $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, pero en este caso, para recorrer todos los nudos del retículo no es insuficiente situar el vector $\vec{R}_{n1,\,n2,\,n3}$ en el origen de coordenadas. Es preciso, además, instalar su origen en el átomo central. Sólo en este caso serán trasladados ambos retículos cúbicos sencillos que constituyen el retículo CCE.

Los nudos inmediatos de cada nudo del retículo CCE se hallan dispuestos en dirección de la diagonal del cubo elemental (fig. 28, *b*). Cada nudo tiene 8 nudos inmediatos (vecinos), así que $z = 8$. La distancia hasta el nudo más próximo constituye la mitad de la diagonal del cubo, es decir, $\sqrt{3}a/2$, donde la letra *a*, como siempre, designa la longitud de la arista del cubo elemental.

En forma de retículo CCE se cristalizan los metales alcalinos monovalentes Li, Na, K, Rb, Cs, el metal bivalente Ba y una serie de otras sustancias.

Retículo cúbico centrado conforme a sus caras (*abreviadamente* CCC). El cubo elemental del retículo CCC se muestra en la figura 29. Éste difiere del cubo elemental del retículo CS por tener nudos adicionales situados en el centro de cada arista. Para trasladar este cubo hay que colocar el origen del vector $\vec{R}_{n1,\,n2,\,n3}$ en el origen de coordenadas y en el centro de las aristas del cubo que no son opuestas una a otra. Los nudos inmediatos de cada nudo del retículo CCC se hallan dispuestos en dirección de las diagonales de la arista del cubo. La distancia hasta el nudo más próximo es igual a $a/\sqrt{2}$. En cada uno de tres planos recíprocamente perpendiculares, que se cruzan en un nudo dado, hay 4 nudos

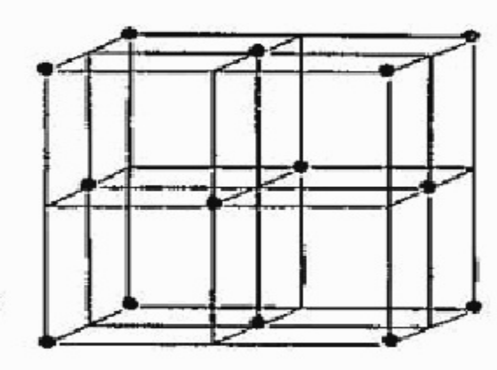


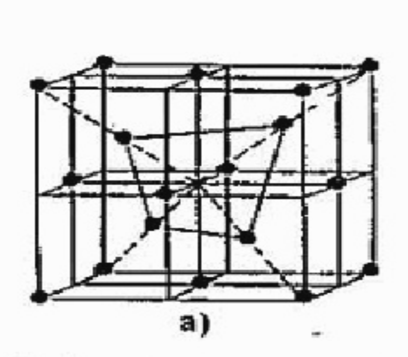
Fig. 29. Cubo elemental de un retículo cúbico centrado con arreglo a las caras.

inmediatos a este nudo, así que el número de nudos inmediatos z es igual a 12.

En forma de retículo CCC se cristalizan tales metales como el cobre, la plata, el oro, el aluminio y el plomo.

El último retículo que se somete a estudio es el retículo del tipo de diamante, el cual se muestra en la figura 30, a. El mismo puede ser representado en forma de dos retículos cúbicos centrados con arreglo a las caras desplazadas una respecto a otra a la distancia de un cuarto de la diagonal del cubo.

En forma de retículo del tipo de diamante se cristalizan los elementos del cuarto grupo de la tabla de Mendeléiev: el carbono (diamante), así como los elementos semiconductores más importantes, tales como el germanio y el silicio. Todos ellos son tetravalentes y sus átomos están enlazados en el retículo por fuerzas covalentes. Elementalmente podemos suponer que cada átomo tiene cuatro "manos" que corresponden a cuatro electrones de valencia. Con esas cuatro manos el átomo coge de la mano a sus cuatro vecinos próximos. El retículo del tipo de diamante está muy bien adaptado para el enlace de tal tipo. Cada nudo de dicho retículo se encuentra en el centro de un tetraedro regular formado por otros nudos (fig. 30, *b*). El número de nudos inmediatos $z = 4$.



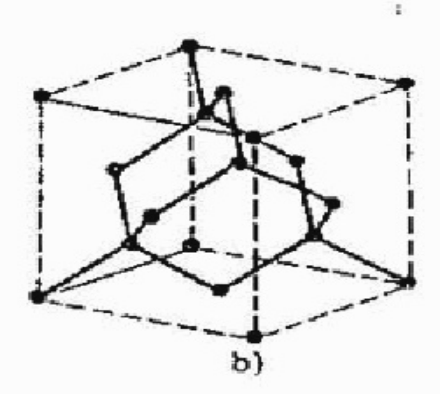


Fig. 30. *a*) Retículo del tipo de diamante; *b*) estructura tetraédrica de los enlaces en el retículo del tipo de diamante.

UMBRALES DE PERCOLACIÓN PARA LOS RETÍCULOS TRIDIMENSIONALES

Los problemas de los enlaces y los nudos se plantean para los retículos tridimensionales exactamente igual que para los retículos planos. Comó antes, se supone que sólo hay enlaces entre los nudos inmediatos.

En la tabla 2 se dan los tipos de umbrales de percolación de los problemas de los nudos y de los enlaces para los retículos tridimensionales descritos anteriormente. Como ya fue dicho, en el caso tridimensional no existe ni una sola solución exacta. Todos los resultados expuestos en la tabla 2 han sido obtenidos por

Tabla 2

UMBRALES DE PERCOLACIÓN PARA LOS RETÍCULOS TRIDIMENSIONALES

Tipo de retículo	x_{en}	x_{nud}
Cúbico sencillo (CS)	0,25	0,31
Cúbico centrado en el espacio (CCE)	0,18	0,25
Cúbico centrado con arreglo a las caras (CCC)	0,12	0,20
Del tipo de diamante	0,39	0,43

distintos métodos aproximados que, por regla general, se utilizan en los ordenadores. Naturalmente que entre los resultados publicados en la literatura científica surgen pequeñas contradicciones. A nuestro juicio, en la tabla 2 se han elegido los resultados más seguros.

Ahora la cuestión consiste en tratar de entender, observando la tabla 2 y la tabla 1, donde se dan los resultados para los retículos planos, por qué para unos retículos los umbrales de percolación son relativamente grandes, y para otros, pequeños. Comencemos por el problema de los enlaces.

¿DE QUÉ DEPENDE EL UMBRAL DE PERCOLACIÓN DEL PROBLEMA DE LOS ENLACES?

Si todos los enlaces son íntegros, cada nudo permanecerá enlazado con otros z nudos inmediatos, donde el número de éstos cambiará considerablemente de un retículo a otro. Con una cantidad determinada de enlaces íntegros x, cada nudo se hallará enlazado con otros zx nudos por término medio. Intentemos comprobar la siguiente hipótesis: ¿podrá la variable zx, que es el

número medio de nudos con los que está enlazado cada nudo, contener la información suficiente para decir si en el retículo hay percolación o no? ¿Puede ser que no se necesite ninguna otra información sobre las propiedades del retículo, salvo el número z, y que la percolación surja en todos los retículos, con el mismo valor de la variable zx? Está bastante claro el hecho de que tal hipótesis no puede ser precisa. ¿Pero, quizás sea correcta aproximadamente?

Esto se verifica fácilmente. Hay que calcular el producto zx_{en} para todos los retículos con umbrales de percolación conocidos del problema de los enlaces. Si dicho producto resulta universal, es decir, idéntico para todos los retículos o, por lo menos, aproximadamente idéntico, entonces esa hipótesis será correcta o aproximadamente correcta.

Los datos correspondientes se exponen en la tabla 3. Se observa que con un error menor del 10%, para los retículos planos es justa la fórmula

$$xz_{en} = 2, \tag{1}$$

y para los retículos tridimensionales, la fórmula

$$xz_{en} = 1{,}5. \tag{2}$$

Por consiguiente, la hipótesis acerca de la universalidad del número medio de enlaces por nudo, necesario para el surgimiento de la percolación, no es una hipótesis precisa, pero se cumple aproximadamente. Si tomamos en consideración el hecho de que tanto en el grupo de los retículos planos, como en el de los

Tabla 3

PRODUCTO zx_{en} PARA DISTINTOS RETÍCULOS

Tipo de retículo	z	x_{en}	zx_{en}
Retículos planos			
Cuadrado	4	0,5	2,0
Triangular	6	0,35	2,1
Hexagonal	3	0,65	2,0
Retículos tridimensionales			
Cúbico sencillo (CS)	6	0,25	1,5
Cúbico centrado en el espacio (CCE)	8	0,18	1,4
Cúbico centrado con arreglo a las caras (CCC)	12	0,12	1,4
Del tipo de diamante.	4	0,39	1,6

retículos tridimensionales, cada una de las variables z y x_{en} cambia, por lo menos, dos veces, la precisión con que en cada grupo la variable zx_{en} es constante ha de reconocerse alta.

Así pues, para apreciar aproximadamente el umbral de percolación del problema de los enlaces, es suficiente conocer el número de nudos inmediatos y utilizar la fórmula (1) en el caso de retículos planos, y la fórmula (2), en el caso de retículos tridimensionales. El umbral de percolación del problema de los enlaces es muy sensible al número de nudos inmediatos, y poco sensible a todas las demás propiedades de los retículos (por ejemplo, al número de segundos nudos inmediatos, es decir, de nudos inmediatos ulteriores según su alejamiento de un nudo dado).

Por lo tanto, hemos obtenido un método muy sencillo y, al mismo tiempo, bastante exacto, de apreciación de los umbrales de percolación del problema de los enlaces, válido para cualquier retículo.

¿CÓMO ESTIMAR EL UMBRAL DE PERCOLACIÓN DEL PROBLEMA DE LOS NUDOS?

Ahora examinemos el esquema de este mismo tipo para el problema de los nudos. Es natural que al principio probemos la variante anterior, es decir, miremos cómo cambia de un retículo a otro la variable zx_{nud}. Es fácil cerciorarse de que ésta cambia igual que cada una de las variables z y x_{nud} por separado. No debemos asombrarnos: en el caso del problema de los nudos, el producto zx_{en} tiene un sentido físico evidente, es decir, constituye el número medio de enlaces enteros correspondientes a un nudo. En el caso del problema de los nudos, el enlace funciona si el mismo une dos nudos blancos, y no funciona en todos los demás casos. Por esta razón, el producto zx_{nud} no tiene ningún sentido particular.

En 1970 los físicos estadounidenses Scher y Zallen propusieron otro método para estimar el umbral de percolación del problema de los nudos. Su idea consistía en oponer a cada nudo cierta porción de espacio. Después de esto se decía que la percolación por los nudos blancos surge cuando la porción de espacio ocupada por ellos supera cierto valor crítico que depende débilmente del tipo de retículo.

Imaginémonos que alrededor de cada nudo del retículo hay una bola (o un círculo en el caso de retículo plano) cuyo radio equivale a la mitad de la distancia hasta el nudo inmediato. Además, las bolas (círculos) construidas en torno a los nudos

inmediatos rozan una con otra (fig. 31). Supongamos que al nudo blanco le pertenece la bola blanca, y al negro, la negra. Si dos nudos blancos están enlazados entre sí, entre ellos habrá una vía que pasará por las bolas blancas que rozan una con otra (fig. 31). Por eso el surgimiento de percolación significa la aparición de vías de longitud infinita, a través de las bolas blancas que rozan entre sí.

Ahora supongamos que la percolación surge cuando la porción de volumen (superficie) completo, ocupada por las bolas blancas (en el caso plano, por los círculos) supera cierto valor crítico que no depende del tipo de retículo. Para comprobar esta conjetura hay que calcular las porciones de volumen ocupadas por las bolas blancas cuando $x = x_{nud}$, para diversos retículos con valores conocidos de x_{nud}, y compararlas una con otra.

Al principio es necesario calcular la porción de volumen ocupada por las bolas blancas cuando $x = 1$, es decir, en el caso cuando todas las bolas son blancas. Dicha variable se designa por la letra f y se llama *coeficiente de relleno*, el cual equivale a la porción de volumen ocupada por las bolas construidas en torno a cada nudo del retículo y cuyo radio es igual a la mitad de la distancia hasta el nudo inmediato. El coeficiente de relleno depende considerablemente del tipo de retículo, y para cada uno de éstos ha de calcularse por separado.

Para determinar la porción de volumen ocupada por las bolas blancas cuando $x < 1$ es preciso multiplicar el coeficiente de relleno por la cantidad de bolas blancas, es decir, por x. Así pues, la

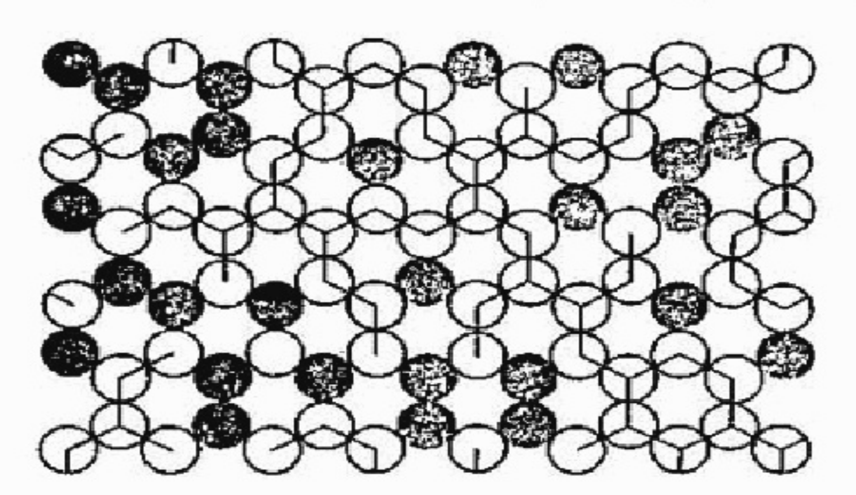


Fig. 31. Construcción de circunferencias tangentes entre sí en el caso de un retículo hexagonal. El propio retículo está representado en la figura 16, *c*. El radio de las circunferencias equivale a la mitad de la distancia hasta la circunferencia vecina más cercana. A los nudos claros les corresponden las circunferencias blancas, y a los oscuros, las negras. Las vías de percolación por las circunferencias blancas se señalan con líneas gruesas.

porción de volumen ocupada por las bolas blancas es igual a fx. Pero en el umbral de percolación, esa porción constituye fx_{nud}. Si fuera correcta la suposición acerca de la universalidad de la porción de volumen con la que surge la percolación, entonces la variable fx_{nud} debería ser idéntica para todos los retículos.

Los coeficientes de relleno para distintos retículos se ofrecen en la segunda columna de la tabla 4. Para imaginarnos cómo éstos fueron obtenidos, se calcula la variable f para el retículo hexagonal representado en la figura 31. En el ejercicio 4 del capítulo 5 fue mostrado que a un nudo del retículo hexagonal le corresponde una superficie de $(3\sqrt{3}/4)a^2$, donde a es el lado del hexágono. Este resultado tiene el siguiente sentido: dibujemos en la superficie donde está trazado el retículo, un cuadrado, un rectángulo, un círculo o cualquier otra figura geométrica, pero que sus dimensiones sean obligatoriamente muchas veces mayores que las distancias entre los nudos inmediatos del retículo. Dividamos su superficie por el número de nudos del retículo que resultaron dentro de esa figura. La superficie correspondiente a un nudo es el límite de dicha relación al aumentar infinitamente las dimensiones de la figura.

La porción de superficie ocupada por los círculos es igual al límite de la relación entre la superficie ocupada por los círculos y la superficie de la figura grande. La superficie ocupada por los círculos es igual al número de nudos pertenecientes a la figura grande, multiplicado por la superficie de un círculo. Con otras palabras, la variable f es igual a la relación entre la superficie de un círculo y la superficie correspondiente a un nudo.

Tabla 4

PRODUCTOS fx_{nud} PARA DISTINTOS RETÍCULOS

Tipo de retículo	f	x_{nud}	fx_{nud}
Retículos planos			
Cuadrado	0,79	0,59	0,47
Triangular	0,91	0,5	0,46
Hexagonal	0,61	0,7	0,43
Retículos tridimensionales			
Cúbico sencillo (CS)	0,52	0,31	0,16
Cúbico centrado en el espacio (CCE)	0,68	0,25	0,17
Cúbico centrado con arreglo a las caras (CCC)	0,74	0,20	0,15
Del tipo de diamante	0,34	0,43	0,15

El radio de los círculos construidos en la figura 31 constituye $a/2$ y, por consiguiente, su superficie es igual a $\pi a^2/4$. De aquí obtenemos

$$f = \frac{\pi a^2}{4} / \frac{3\sqrt{3}\,a}{4} = \frac{\pi}{3\sqrt{3}} \approx 0{,}605.$$

De manera análoga se calculan los coeficientes de relleno para otros retículos, con la particularidad de que, como se deduce de la tabla 4, éstos cambian dentro de amplios límites.

Los productos fx_{nud} se ofrecen en la última columna de la tabla 4. Se ve que la suposición de que fx_{nud} no depende del tipo de retículo, no se cumple con exactitud. Sin embargo, tanto en el grupo de retículos planos como en el de retículos tridimensionales, ese producto cambia muy poco. De aquí se deduce que con una precisión del orden del 10 al 15% son justas las fórmulas:

$$fx_{\text{nud}} = 0{,}5 \qquad (3)$$

para los retículos planos, y

$$fx_{\text{nud}} = 0{,}16 \qquad (4)$$

para los retículos tridimensionales.

Como es relativamente fácil calcular el coeficiente de relleno f, las fórmulas (3) y (4) dan la posibilidad de estimar el umbral de percolación del problema de los nudos para cualquier retículo.

Es fácil comprender que la porción crítica del volumen ocupado por bolas blancas, con la cual surge la percolación, disminuye monótonamente con el aumento de la dimensión del espacio. En un espacio unidimensional, es decir, en una cadena lineal de nudos, la percolación por los nudos blancos es imposible con una concentración muy pequeña de nudos negros. Incluso un solo nudo negro cierra la vía de percolación, ya que es imposible contornearlo. En el retículo plano (bidimensional) aparece la posibilidad de contornear los nudos negros, pero en el retículo tridimensional (volumétrico) esas posibilidades son mayores, ya que las vías de rodeo no están limitadas por la superficie.

El concepto de volumen crítico resulta fructífero no sólo para los problemas reticulares. En el capítulo 9 tropezaremos con un problema en el que las bolas blancas y negras no se encuentran en general en los nudos del retículo, sino que permanecen como metidas en un tarro desordenadamente. A nosotros nos interesará la cuestión de la percolación por las bolas blancas que rozan una con otra. Resulta que dicha percolación también surge cuando el volumen ocupado por tales bolas constituye alrededor de 0,16 del

volumen total. Este resultado cambia débilmente cuando las bolas se distinguen una de otra con arreglo a su radio.

En el capítulo 10 se examina el problema del espacio que ha sido casualmente pintado de color blanco y negro. Resulta que la percolación por las zonas de un color surge, en el caso plano, cuando la porción de superficie pintada de ese color constituye justamente 0,5, y en el caso tridimensional, cuando la porción de volumen pintada de ese color constituye aproximadamente 0,16.

EJERCICIO

1. Comprueben si han sido correctamente calculados los coeficientes de relleno f expuestos en la tabla 4.

Capítulo 7
SUSTANCIA FERROMAGNÉTICA DE LARGO ALCANCE Y PROBLEMA DE LAS ESFERAS

En los problemas de los nudos y los enlaces, que hemos examinado hasta ahora, se suponía que cada nudo puede estar directamente enlazado sólo con los nudos inmediatos, y que los enlaces entre los nudos lejanos se establecen según una cadena de nudos, cada uno de los cuales se halla enlazado con los nudos inmediatos. En este capítulo, el problema de los nudos se generaliza para el caso cuando los nudos que no son inmediatos permanecen directamente enlazados entre sí. Tal problema puede resultar prácticamente importante y, por lo tanto, es útil saber que el mismo se ha estudiado bastante bien.

Si es grande el número de nudos con los que está enlazado un nudo dado, el problema de los nudos se convierte en un problema completamente nuevo, llamado *problema de las esferas*. Éste desempeña en la teoría de percolación un papel muy importante. Con su ayuda tratan de comprender la transición a la conductibilidad de tipo metálico que transcurre en los semiconductores a medida que aumenta la concentración de impurezas. En la solución de este problema se basa la teoría de la conductibilidad a saltos de los semiconductores, que constituye un fenómeno muy importante e interesante el cual se desarrolla a temperaturas muy bajas. Por eso el problema de las esferas fue estudiado por muchos científicos y para él y otros problemas semejantes se han obtenido resultados interesantes.

El problema de las esferas también es interesante por el hecho de que representa el primer *problema no reticular* con el que tropezamos en este libro. Los elementos arbitrarios que figuran en él no se dan en los nudos de un retículo periódico.

SUSTANCIA FERROMAGNÉTICA DE LARGO ALCANCE

Volvamos al problema de las sustancias ferromagnéticas con átomos extrínsecos no magnéticos, el cual fue examinado en el capítulo 3. En ese capítulo se consideraba que los átomos no magnéticos orientan sus momentos magnéticos paralelamente, pero sólo cuando los mismos son vecinos próximos o están enlazados con una cadena de átomos magnéticos que son inmediatos uno de otro. Pero si todos los átomos inmediatos al átomo magnético resultaban no magnéticos, el momento magnético de tal átomo se consideraba orientado arbitrariamente.

Tal modelo se basaba en el hecho de que la interacción de los momentos magnéticos, la cual conduce a la orientación paralela, disminuye con la distancia muy rápidamente, de tal modo que los momentos magnéticos que no son inmediatos "no saben nada" uno de otro, es decir, no reaccionan entre sí.

En cristalografía, el grupo de átomos que son inmediatos a cierto átomo suele llamarse *primer grupo de coordinación* y el número de átomos inmediatos z, como ya fue dicho, se denomina número de coordinación. El conjunto de átomos equitativos, que son segundos átomos inmediatos conforme al grado de su alejamiento de un átomo dado, se denomina *segundo grupo de coordinación*, etc. Examinemos como ejemplo un retículo cúbico sencillo (véase la fig. 12). El primer grupo de coordinación en este retículo lo integran 6 átomos dispuestos en las aristas del cubo que salen del átomo inicial. El segundo grupo de coordinación está formado por 12 átomos situados en las diagonales de las caras del cubo que pasan por el átomo inicial. Y por último, el tercer grupo de coordinación lo integran 8 átomos situados en las diagonales del cubo que pasan por el átomo inicial.

En el capítulo 3 se suponía que la interacción de los momentos magnéticos se extiende tan sólo al primer grupo de coordinación. El cálculo de la porción crítica de átomos magnéticos, con la cual aparecía (o desaparecía) la imantación espontánea, se reducía, en esta suposición, al problema de los nudos con enlaces sólo entre los nudos inmediatos.

La suposición "acerca de la interacción corta" (o acción corta) no siempre se justifica, y por eso tiene sentido examinar el

problema en el que se estima que la interacción de los momentos magnéticos se extiende a varios grupos de coordinación, hallando la porción crítica de átomos magnéticos con la que surge la imantación espontánea.

Este problema se reduce al problema de los nudos en el que se hallan enlazados no sólo los nudos inmediatos. Su enunciación no contiene en realidad nada nuevo. Los nudos suelen ser blancos y negros (magnéticos y no magnéticos). Dos nudos blancos se consideran enlazados entre sí cuando los enlaces se extienden al grupo de coordinación en el que se encuentra uno de ellos respecto al otro. Si el nudo *A* está enlazado con el *B*, y el nudo *B*, con el *C*, el nudo *A* también estará enlazado con el *C*. El conjunto de nudos enlazados forma un racimo. Llámase umbral de percolación la porción de nudos blancos con la que surge un racimo infinito.

Es absolutamente evidente el hecho de que el umbral de percolación x_{nud} debe disminuir a medida que los enlaces se extiendan a los grupos de coordinación más lejanos. Cuanto más enlaces salgan de un nudo blanco dado, tanto mayor será la posibilidad de que por lo menos uno de ellos conduzca a otro nudo blanco y, respectivamente, tanto menos nudos blancos se necesitarán para asegurar la percolación.

Claro está que resolver tal problema no es más fácil (¡incluso es más difícil!) que resolver el problema ordinario de los nudos. Sin embargo, una serie de problemas de este tipo fue solucionado mediante diversos procedimientos aproximados, y en la tabla 5 se exponen los resultados de uno de ellos. En la primera columna de dicha tabla está escrito el tipo de retículo y los números de los grupos de coordinación a los que se extienden los enlaces. En la segunda columna figura el número de nudos *Z* con los que se halla enlazado cada nudo, es decir, el número total de nudos que se encuentran en los grupos de coordinación sometidos a estudio. (En el caso de un solo grupo de coordinación, ese número coincide con el número de coordinación *z*).

En la última columna de la tabla está escrito el producto Zx_{nud}. Como ya fue dicho en el apartado anterior, en el caso del problema de los nudos con enlaces en el primer grupo de coordinación, ese producto depende mucho del tipo de retículo. Pero como se deduce de la tabla 5, con grandes valores de *Z*, el mismo varía cada vez menos a medida que aumenta *Z*. Eso se manifiesta con evidencia en el caso de los retículos tridimensionales, donde se utilizan grandes valores de *Z*. El producto Zx_{nud} tiende ostensiblemente a un número del orden de 2,6 ... 2,7, el cual no depende del tipo de retículo.

Tabla 5

UMBRALES DE PERCOLACIÓN DEL PROBLEMA DE LOS NUDOS CON ENLACES ENTRE LOS NUDOS VECINOS ALEJADOS[1]

Tipo de retículo	Z	x_{nud}	Zx_{nud}
Retículos planos			
Hexagonal, 1	3	0,700	2,10
Cuadrado, 1	4	0,590	2,36
Triangular, 1	6	0,500	3,00
Cuadrado, 1, 2	8	0,410	3,28
Triangular, 1, 2	12	0,295	3,54
Hexagonal, 1, 2, 3	12	0,300	3,60
Cuadrado 1, 2, 3	12	0,292	3,50
Triangular 1, 2, 3	18	0,225	4,05
Retículos tridimensionales			
Del tipo de diamante	4	0,425	1,70
CS 1	6	0,307	1,84
CCE 1	8	0,243	1,94
CCC 1	12	0,195	2,34
CCE 1, 2	14	0,175	2,45
CC 1, 2	18	0,137	2,47
CCC 1, 2	18	0,136	2,45
CS 1, 2, 3	26	0,097	2,52
CCE 1, 2, 3	26	0,095	2,47
CCC 1, 2, 3	42	0,061	2,56

[1] Para el caso de un solo grupo de coordinación, los valores expuestos de los umbrales no siempre coinciden exactamente con los datos de las tablas anteriores. Eso está relacionado con el hecho de que en ellas fueron seleccionados los datos más fidedignos, desde nuestro punto de vista. En esta tabla se comparan los datos obtenidos por un mismo procedimiento.

En el caso tridimensional, precisamente el número 2,7 se considera hoy día como el valor más fidedigno (con una exactitud de $\pm 0{,}1$) de la variable B_c determinada como límite Zx_{nud} con grandes valores de Z:

$$B_c = \lim_{Z \to \infty} Zx_{nud}. \tag{1}$$

En los apartados posteriores se explicará por qué tal límite existe y por qué él no depende del tipo de retículo, sino solamente de la dimensión del espacio, es decir, de si el retículo examinado es plano o es tridimensional.

Para comprenderlo es necesario tener una idea del problema de las esferas.

EJERCICIO

1. Indiquen dónde se encuentran los 42 nudos pertenecientes a los tres primeros grupos de coordinación de un retículo cúbico centrado con arreglo a las caras (CCC).

PROBLEMA DE LAS CIRCUNFERENCIAS (ESFERAS)

Examinemos ahora otro problema o, mejor dicho, un problema que a primera vista parece que es otro. Supongamos que en el plano están dibujadas circunferencias de radio idéntico, igual a R, cuyos centros se hallan distribuidos en ese plano caóticamente y, por término medio, de modo uniforme. Esto significa que ambas coordenadas de los centros de las circunferencias son números aleatorios uniformemente distribuidos en el intervalo de cero a L, donde L es una longitud muy grande (en comparación con R), la cual caracteriza el tamaño del sistema sujeto a examen. El rasgo característico de este problema es que las circunferencias pueden recubrirse mutuamente tanto como se quiera. El número medio de centros de circunferencias correspondientes a la unidad de área es igual a N. Con otras palabras, N es la concentración de centros de circunferencias.

Dos circunferencias se consideran enlazadas una con otra si el centro de una de ellas se encuentra dentro de la otra. Tales circunferencias a veces se denominan circunferencias entrelazadas. Si la circunferencia A está enlazada con la B, y la B con la C, entonces la A también estará enlazada con la C. Por consiguiente, las circunferencias alejadas una de otra pueden permanecer enlazadas mediante una cadena de circunferencias entrelazadas (fig. 32).

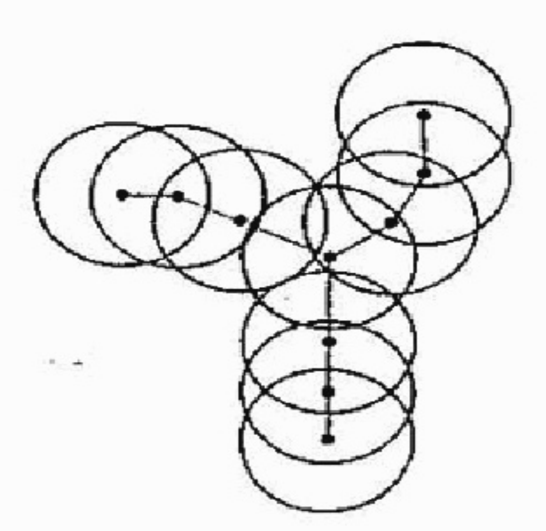


Fig. 32. Las vias de percolación por las circunferencias entrelazadas se indican con lineas quebradas. Los puntos representan los centros de las circunferencias.

7 437

El problema consiste en que para hallar el valor crítico de la concentración N, con el que surge la percolación por las circunferencias entrelazadas, es decir, con el que aparecen vías que pasan a través de todo el sistema y que constan de circunferencias entrelazadas. (Con otras palabras, surge un racimo infinito de circunferencias enlazadas entre sí.)

En el problema se han introducido dos parámetros: la concentración N y el radio R. (Tenemos también la dimensión del sistema L, pero claro que si el sistema es bastante grande, el valor crítico N depende muy poco de L.) Entre tanto, es fácil convencerse de que la falta o la presencia de percolación depende no de dos parámetros, sino de uno solo, el cual es el producto adimensional NR^2. (En el caso del problema plano, la dimensión de la concentración se da en cm^{-2}.) En calidad de tal parámetro es conveniente elegir el número medio de centros de circunferencias que se encuentran dentro de una de éstas. El mismo es igual a

$$B = \pi NR^2.$$

En que la percolación aparece con cierto valor del parámetro B, y que ella no depende de los valores de las variables N y R por separado, es fácil convencerse del siguiente modo. Supongamos que se ha dado un plano con circunferencias dibujadas en él. Ampliemos dicho cuadro varias veces, por ejemplo, con ayuda de un proyector. Esto será precisamente la transformación que modifica N y R, pero que no modifica B, ya que el número de centros de circunferencias que se encuentra dentro de una de éstas no cambia después de la ampliación.

También es fácil comprender que esa transformación no se refleja en la percolación. Si no había percolación en el cuadro inicial, la misma faltará también en el cuadro ampliado y, viceversa, si en el cuadro inicial había percolación por las circunferencias entrelazadas, después de la ampliación ésta no desaparecerá.

Así pues, la transformación que modifica N y R pero que no modifica B, no se refleja en la percolación. Por lo tanto, la falta o la presencia de percolación en el sistema sólo depende del valor del parámetro B. Con grandes valores de dicho parámetro hay percolación, y con pequeños, no.

Este nuevo problema que acabamos de enunciar se denomina *problema de las circunferencias*. Su análogo tridimensional llámase *problema de las esferas*. El problema de las esferas se enuncia del modo siguiente. En un espacio tridimensional, con ayuda de un generador de números aleatorios se establecen las coordenadas de los centros de las esferas que tienen radio R. Dos esferas se llaman

enlazadas entre sí (o entrelazadas), si el centro de una se encuentra dentro de otra. Es necesario determinar la concentración crítica de centros, con la cual surge percolación por las esferas entrelazadas.

Es fácil entender que, al igual que en el caso plano, la presencia de percolación sólo se determina por el valor del parámetro B, que es el número medio de centros de esferas que se encuentran dentro de una de éstas:

$$B = \frac{4\pi}{3} N R^3,$$

donde N es el número medio de esferas en la unidad de volumen (la concentración volumétrica se mide en cm^{-3}).

Como ya fue dicho, el problema de las esferas tiene importancia en la teoría de la electroconductibilidad de los semiconductores a bajas temperaturas. Por eso el mismo ha sido estudiado por muchos autores mediante diversos procedimientos. Según los datos actuales, el valor crítico de B_c, con el cual surge percolación por las esferas, es igual a $2{,}7 \pm 0{,}1$. El problema de las circunferencias se ha investigado menos intensamente, por lo cual, los resultados obtenidos por diversos autores se distinguen considerablemente. Es probable que el valor de $B_c = 4{,}1 \pm 0{,}4$.

EL PROBLEMA DE LAS CIRCUNFERENCIAS (ESFERAS) ES EL CASO LÍMITE DEL PROBLEMA DE LOS NUDOS

Volvamos al problema de los nudos, en el que se hallan enlazados entre sí no sólo los nudos inmediatos, y expliquemos por qué existe el límite situado en el segundo miembro de la fórmula (1), por qué tal límite no depende del tipo de retículo y, por último, por qué el mismo está designado por la misma letra B_c que los valores de umbral en los problemas de las circunferencias y las esferas.

Comencemos por enunciar, de modo algo diferente, el problema de los nudos. Para concretar hablaremos al principio de los retículos planos. La generalización con arreglo a los retículos tridimensionales es muy fácil.

Construyamos en torno a cada nudo blanco una circunferencia de radio R elegido de tal modo que sea mayor que la distancia desde este nudo hasta los nudos del último grupo de coordinación con el que dicho nudo está enlazado, pero que sea menor que la distancia hasta los nudos del siguiente grupo de coordinación. Consideremos que las circunferencias permanecen enlazadas una

con otra si permanecen enlazados los nudos blancos en torno a los cuales éstas han sido construidas. Eso significa que las circunferencias se hallarán enlazadas en el caso de que el centro de una de ellas se encuentre dentro de otra, es decir, si las mismas permanecen entrelazadas.

La aparición de un racimo infinito de nudos blancos enlazados equivale al surgimiento de percolación por las circunferencias entrelazadas. Por consiguiente, cuando la cantidad crítica de nudos blancos constituye x_{nud}, aparece percolación por las circunferencias de radio R construidas en torno a tales nudos (fig. 33).

Es fácil entender el sentido de la variable Zx. La magnitud Z es el número de nudos (tanto negros como blancos) que se encuentran dentro de una circunferencia, mientras que la variable Zx es el número medio de centros de circunferencias situados dentro de una de ellas (o el número medio de nudos blancos situados dentro de una circunferencia). La variable Zx_{nud} es el número medio de centros de circunferencias situados dentro de una de ellas y con el cual surge percolación, es decir, con el que aparecen vías infinitas en las circunferencias entrelazadas.

De aquí se deduce que el producto Zx_{nud} tiene el mismo sentido que la variable B_c en el problema de las esferas. Ahora, por lo visto, es más difícil comprender en qué se distingue el problema de los nudos del problema de las circunferencias, que entender por qué se parecen esos problemas. No obstante, existe diferencia, y ella es considerable. El hecho consiste en que en el problema de las circunferencias, en calidad de centros de éstas pueden ser cualesquier puntos en el plano, mientras que en el problema de los nudos, esos centros sólo pueden ser los nudos del retículo sujeto

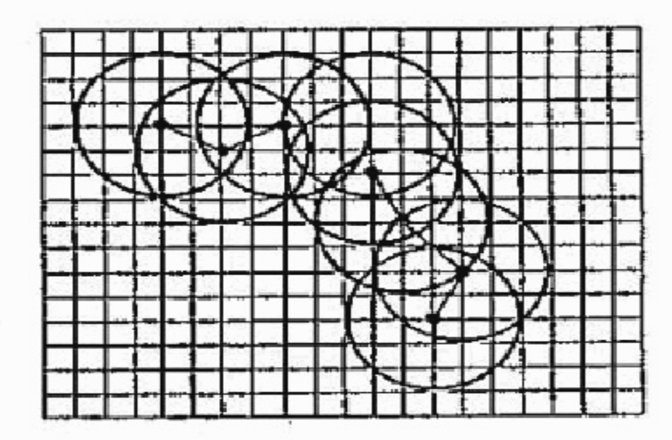


Fig. 33. Vía de percolación por las circunferencias entrelazadas construidas en un retículo cuadrado. La interacción se toma en consideración a una distancia tres veces mayor que el espacio entre las circunferencias vecinas más cercanas. La vía de percolación se muestra con una línea quebrada.

a examen (fig. 33). Si no es grande el número de nudos situados dentro de una circunferencia, la diferencia entre esos dos problemas resultará muy importante. Naturalmente que en tales condiciones el valor crítico de Zx_{nud} dependerá del tipo de retículo. El número completo de nudos que se encuentran dentro de una circunferencia es igual a Z. Como se deduce de la tabla 5, con valores de Z no muy grandes, los valores de Zx_{nud} para distintos retículos se diferencian realmente.

Pero cuando el número Z es grande, la diferencia entre ambos problemas desaparece. Supongamos que hemos comenzado por el problema de las circunferencias y después hemos desplazado el centro de cada una de ellas hasta el nudo inmediato del retículo. Esto ya será el problema de los nudos. Si dentro de cada circunferencia hay muchos nudos del retículo, entonces, con una probabilidad considerable, tal desplazamiento no contribuirá a que las circunferencias no enlazadas resulten enlazadas, o viceversa. De aquí se deduce que cuando $Z \to \infty$, el problema de los nudos y el problema de las circunferencias resultan equivalentes. El valor de B_c, determinado por la fórmula (1), no depende del tipo de retículo y coincide con la variable B_c determinada en el problema de las circunferencias.

Estos razonamientos pueden ser transferidos por completo al caso tridimensional. Para los retículos tridimensionales, la variable B_c, determinada por la fórmula (1), coincide con la variable B_c determinada en el problema de las esferas.

Así pues, cuando el valor de Z es grande, el problema de los nudos en cualquier retículo plano se reduce al problema de las circunferencias, mientras que el problema de los nudos en el retículo tridimensional se reduce al problema de las esferas. Por consiguiente, el límite en la fórmula (1) realmente no depende del tipo de retículo, sino que depende de la dimensión del espacio en el que se encuentra este retículo. (¡Las variables B_c son diferentes para las circunferencias y las esferas!)

Capítulo 8
ELECTROCONDUCTIBILIDAD DE LOS SEMICONDUCTORES EXTRÍNSECOS Y PROBLEMA DE LAS ESFERAS

La teoría de percolación resultó extraordinariamente útil para el entendimiento de los procesos que transcurren en los semiconductores con impurezas (éstos se denominan

semiconductores *extrínsecos* a diferencia de los semiconductores llamados *puros* o *intrínsecos*). Se puede decir que en la actualidad, los semiconductores extrínsecos constituyen uno de los principales campos de aplicación de la teoría de percolación. Acerca de los referidos semiconductores se habla en varios capítulos del libro. Comenzamos el presente capítulo por el análisis de las ideas contemporáneas relacionadas con ellos, suspendiendo temporalmente la exposición de la teoría de percolación.

SEMICONDUCTORES INTRÍNSECOS

Al principio hablaremos de los semiconductores intrínsecos, tomando como base los elementos semiconductores del cuarto grupo de la tabla de Mendeléiev, tales como el germanio y el silicio. Estos elementos se cristalizan en un retículo del tipo de diamante (fig. 30, *a* y *b*). En la capa externa de cada átomo hay cuatro electrones que forman enlaces con cuatro electrones inmediatos. El carácter de movimiento de los electrones exteriores es tal que su densidad no se distribuye uniformemente en torno al átomo, sino que permanece concentrada en cuatro haces dirigidos del centro del tetraedro donde se encuentra cada átomo, hacia los ángulos de ese tetraedro. Precisamente estos haces atraen los átomos del cristal, evitando que este último se desintegre.

Podemos imaginarnos que cada átomo tiene cuatro manos con las que él coge de las manos a sus cuatro vecinos. Además, cada electrón se halla fuertemente enlazado con sus vecinos y si aplicamos al semiconductor un campo eléctrico no muy fuerte, éste no engendrará corriente eléctrica: el número de electrones equivale exactamente al número de éstos, necesario para formar enlaces, mientras que para separar el electrón que realiza el enlace se necesita gran energía. Ésta, o mejor dicho, el trabajo mínimo necesario para que el electrón que se encuentra en estado enlazado pase al estado en el que él pueda moverse libremente en el cristal, llámase *anchura de la rendija de energía* (o simplemente ancho de la rendija) y se designa por E_g.

El ancho de la rendija de energía es la característica más importante del semiconductor, la cual determina en sumo grado todas sus propiedades eléctricas. Examinemos, por ejemplo, la electroconductibilidad. En un semiconductor puro (intrínseco), la electroconductibilidad se realiza a expensas de que cierta cantidad de enlaces están rotos. Al romperse el enlace surge un electrón capaz de conducir la corriente eléctrica, así como un átomo "mutilado", "de tres manos". Este "inválido" también es portador de

corriente, pero de otro signo, a diferencia del electrón. En efecto, bajo la acción del campo eléctrico, el electrón del átomo inmediato puede pasar al átomo "de tres manos" casi sin modificar su energía. Como resultado, el otro átomo se convertirá en átomo "de tres manos". Este proceso puede continuar; además, es muy fácil comprender que si los electrones accionados por el campo, se mueven de izquierda a derecha, el átomo "de tres manos", a causa de tal proceso, se moverá de derecha a izquierda. (Es importante entender que los propios átomos permanecen inmóviles. Simplemente a expensas del movimiento de los electrones, los átomos se convierten en átomos "de tres manos", ora uno, ora otro átomo). Por esta razón, el átomo "de tres manos" también puede ser considerado como portador de corriente, con la particularidad de que, a diferencia del electrón, a él se le debe atribuir carga positiva, y no negativaa.

En los semiconductores que constan de átomos de otra valencia, el cuadro microscópico es algo diferente, pero en todos los casos, al romperse el enlace, surgen dos portadores de corriente que tienen distintos signos. Uno de ellos (negativo) se llama electrón, y el otro (positivo), *hueco*. Por lo tanto, el átomo "de tres manos" es un caso particular del hueco.

La energía necesaria para romper los enlaces se adquiere de la energía del movimiento térmico de los átomos. En física estadística se demuestra que, a altas temperaturas, a un átomo que realiza pequeñas oscilaciones cerca de la posición de equilibrio le corresponde, por término medio, la energía de un movimiento térmico que constituye $3kT$, donde T es la temperatura en grados Kelvin, y k, la constante de Boltzmann ($k = 1{,}38 \cdot 10^{-16}$ ergios/K).

Por regla general, el ancho de la rendija E_g se mide en electrón-voltios (eV). Un electrón-voltio es el trabajo que realiza un electrón al recorrer una trayectoria con una diferencia de potencial de 1 V: $1\ \text{eV} = 1{,}6 \cdot 10^{-19}\ \text{J} = 1{,}6 \cdot 10^{-12}$ ergios. En el germanio, $E_g = 0{,}7$ eV, y en el silicio, $E_g = 1{,}1$ eV. A temperatura ambiente (300 K), la energía de $3kT$ constituye tan sólo 0,08 eV. Esta energía es mucho menor que la necesaria para romper el enlace tanto en el germanio como en el silicio.

Sin embargo, el movimiento térmico tiene carácter desordenado y, en determinados momentos, la energía del movimiento del átomo puede resultar muy grande. Con cada uno de los átomos por separado eso ocurre rara vez, pero, en cambio, la cantidad de ellos es enorme. En 1 cm^3 hay 10^{23} átomos aproximadamente. (Recordemos que el número de átomos en un mol equivale al número de Avogadro, o sea, a $6 \cdot 10^{23}$.)

Por eso la concentración de electrones y huecos que aparecen

al romperse los enlaces, es mucho menor que la concentración de átomos, pero, a pesar de todo, esa concentración es tan grande, que en cierta región de temperaturas puede asegurar una electroconductibilidad considerable. El cálculo muestra que en el germanio, a $T = 300$ K, la concentración de electrones es del orden de 10^{13} cm^{-3}. En el silicio, donde la rendija es más ancha, a esa misma temperatura la concentración es mucho menor (10^{10} cm^{-3}). Al bajar la temperatura, la concentración de electrones disminuye bruscamente, aumentando respectivamente la resistencia del semiconductor intrínseco.

Cuanto mayor sea el ancho de la rendija de energía, tanto menor será el número de portadores de corriente a una temperatura dada. Toda la diferencia entre el semiconductor y el dieléctrico consiste tan sólo en el ancho de la rendija. Los materiales con E_g del orden de 5 eV y mayor, suelen llamarse dieléctricos. A temperatura ambiente, ellos prácticamente no contienen portadores de corriente.

Si la diferencia entre el dieléctrico y el semiconductor es más bien cuantitativa que cualitativa, la diferencia entre el metal y el dieléctrico tiene carácter de principio. En el metal, el ancho de la rendija de energía es igual a cero, mientras que la concentración de portadores de corriente es grande incluso cerca del cero absoluto.

SEMICONDUCTORES EXTRÍNSECOS

Supongamos que en el germanio o en el silicio se han introducido, en calidad de impurezas, los elementos del quinto grupo de la tabla de Mendeléiev, tales como el fósforo, el antimonio y el arsénico. Los átomos de tales elementos tienen cinco electrones exteriores. Si tal átomo reemplaza, por ejemplo, el átomo de germanio que se encuentra en el centro del tetraedro, cuatro electrones suyos formarán enlaces con cuatro electrones inmediatos, y el quinto electrón quedará de más. Este último se halla enlazado con su átomo, ya que si el mismo se separase, el átomo permanecería positivamente cargado y atraería de nuevo su electrón. Por lo tanto, para que el electrón permanezca muy alejado del átomo, hay que realizar cierto trabajo en contra de las fuerzas de atracción. Ese trabajo se denomina *energía de enlace* del electrón con el átomo.

Como se mostrará más adelante, la energía de enlace del electrón excedente es relativamente pequeña, lo cual contribuye a que él se mantenga muy lejos del átomo extrínseco (en comparación con el período de la red cristalina). Por ese motivo, toda la estructura del átomo extrínseco recuerda la estructura del

átomo más sencillo, es decir, la del hidrógeno. Recordemos que el átomo de hidrógeno consta de un núcleo pesado con carga positiva, y de un electrón negativo ligero. Además, las dimensiones del núcleo son ínfimas en comparación con la distancia del núcleo al electrón.

El átomo extrínseco tiene una estructura análoga. Pero en este caso, el papel de núcleo de hidrógeno lo desempeña no sólo el núcleo del átomo extrínseco, sino también sus electrones interiores y los cuatro que han formado los enlaces. El tamaño de toda esta formación, como veremos ahora, es pequeño en comparación con la distancia hasta el electrón excedente, mientras que la carga de la formación es positiva y, según su valor absoluto, equivale a la carga del electrón.

Como es sabido, en el átomo de hidrógeno, el electrón está alejado del núcleo a una distancia del orden del llamado radio de Bohr a_B, el cual se expresa mediante la fórmula

$$a_B = \frac{\hbar^2}{me^2} \approx 0{,}53 \cdot 10^{-8} \text{ cm}. \quad (1)$$

Aqí $\hbar = 1{,}05 \cdot 10^{-27}$ ergios · s es la constante de Planck (dividida entre 2π); $m = 9{,}8 \cdot 10^{-28}$ g, la masa del electrón; y $e = 4{,}8 \cdot 10^{-10}$ en unidades CGSE, la carga del electrón.

La constante fundamental $\hbar$ fue introducida por el físico alemán Max Planck en 1901 al plantear la hipótesis acerca del carácter cuántico de las ondas electromagnéticas. Esta constante entra en la ecuación cuantomecánica que describe el movimiento del electrón en torno al núcleo. Además de dicha constante, en la ecuación sólo entran las constantes e y m. El radio de Bohr a_B es el único valor que tiene dimensión de longitud y que puede ser integrado por e, m y $\hbar$.

La energía de enlace del electrón en el átomo de hidrógeno es igual a

$$E_B = \frac{me^4}{2\hbar^2} \approx 13{,}6 \text{ eV}. \quad (2)$$

Con arreglo al orden de magnitud, esta fórmula puede ser interpretada del modo siguiente. El núcleo positivo, a una distancia r genera un potencial igual a e/r. A una distancia del orden de a_B ese potencial equivale a e/a_B, y a una distancia infinitamente grande, el mismo es igual a cero. Por lo tanto, el trabajo que es necesario gastar para que el electrón alejado del núcleo a una distancia del orden de a_B sea trasladado a una distancia infinitamente grande, constituye, según el orden de

magnitud, e^2/a_B (la diferencia de potencial multiplicada por la carga del electrón).

Volvamos ahora al átomo extrínseco. Las fórmulas escritas para el átomo de hidrógeno han de ser modificadas a fin de tomar en consideración el hecho de que el electrón excedente se mueve no en el vacío, sino en la red cristalina del semiconductor. En este caso cambia el aspecto de la ley de Culombio. La fuerza que actúa sobre el electrón situado a la distancia r del núcleo, es ahora igual a $e^2/\varepsilon r^2$ y no a e^2/r^2 (en unidades CGSE), donde ε es la constante dieléctrica del cristal. Esta circunstancia puede ser tomada en consideración al sustituir, en las expresiones para a_B y E_B, la variable e^2 por e^2/ε. Además, hay que tener en cuenta que la masa que describe el movimiento del electrón por el cristal, no coincide con la masa del electrón libre m.

El hecho es que en el cristal existe un potencial eléctrico periódico engendrado por los núcleos de los átomos del semiconductor y por los electrones interiores. Una de las conclusiones más interesantes de la teoría cuántica del sólido consiste en que, si ese potencial es exactamente periódico, el electrón casi no lo notará. Este "casi" consiste en que, omitiendo el potencial periódico de la ecuación de movimiento del electrón, es preciso sustituir simultáneamente la masa m de este último por la masa m^* que depende de las propiedades del cristal. La variable m^* se denomina *masa eficaz*.

El átomo extrínseco genera un potencial no periódico el cual no puede ser omitido. Pero describiendo el movimiento del electrón en este potencial es posible no tomar en consideración el potencial periódico del cristal sustituyendo m por m^*.

Por consiguiente, la ecuación que describe el movimiento del electrón excedente en el cristal, en torno al átomo extrínseco cargado, se diferencia de la ecuación del movimiento del electrón en el átomo de hidrógeno, por los cambios $e^2 \to e^2/\varepsilon$ y $m \to m^*$.

Designemos por a_B^* la distancia característica, a la cual se halla alejado del átomo extrínseco el electrón excedente, y por E_B^*, la energía de enlace de este electrón. Utilizando las fórmulas (1) y (2), obtenemos

$$a_B^* = 0{,}53 \cdot 10^{-8} \left(\frac{m}{m^*}\right) \varepsilon \ [\text{cm}], \tag{3}$$

$$E_B^* = 13{,}6 \left(\frac{m^*}{m}\right) \frac{1}{\varepsilon^2} [\text{eV}]. \tag{4}$$

Por lo general, en los semiconductores, las masas eficaces son mucho menores que la masa del electrón libre, y la constante dieléctrica es igual a 10 ... 15 (por ejemplo, en el germanio, $m^* \approx 0{,}1\ m$ y $\varepsilon = 16$). Gracias a esto, la distancia característica, a la cual se halla alejado el electrón excedente, constituye, en los semiconductores típicos, desde varias decenas hasta centenares de angström (1 Å $= 10^{-8}$ cm). Esta magnitud es mucho mayor que la distancia interatómica. (En el germanio, esa distancia constituye 2,45 Å).

Esí pues, hemos obtenido que en el átomo extrínseco, el electrón excedente está alejado de este último a gran distancia, y que el mismo se mantiene a esa distancia a expensas de las fuerzas de atracción hacia el núcleo. Partiendo únicamente de que la distancia a_B^* es grande, debe quedar claro el hecho de que la energía de enlace E_B^* es pequeña. En efecto, de los datos expuestos se deduce que la energía de enlace de los semiconductores típicos constituye desde varias centésimas hasta varias milésimas de electrón-voltio, es decir, esa energía es mucho menor que la anchura de la rendija de energía E_g (0,7 eV para el germanio).

Esto es natural, ya que es más fácil separar del átomo extrínseco el electrón excedente, que separar el electrón que realiza el enlace entre los átomos. La energía térmica kT se compara con 0,01 eV a una temperatura del orden de 100 K. Por lo común, a tal temperatura la mayoría de los electrones excedentes se separan de sus átomos extrínsecos y participan en el transporte de la corriente eléctrica. Por lo tanto, los átomos extrínsecos del quinto grupo de la tabla de Mendeléiev ceden con relativa facilidad sus electrones excedentes. Por eso ellos se denominan *donadores*.

Supongamos ahora que los átomos extrínsecos son los elementos del tercer grupo de la tabla de Mendeléiev, tales como el boro, el aluminio, el galio, etc. En la capa exterior de estos átomos se encuentran tres electrones, así que para formar enlaces con sus cuatro vecinos, a ellos les *falta* un electrón. Éste se toma fácilmente de los átomos inmediatos del semiconductor, pero en este caso, uno de los átomos inmediatos se convierte en átomo "de tres manos" o, con otras palabras, en los alrededores del átomo extrínseco aparece un hueco. Tras capturar el cuarto electrón, el átomo extrínseco se carga negativamente. Por eso el hueco es atraído hacia este átomo por las fuerzas eléctricas, y para separarlo hay que realizar cierto trabajo, el cual llámase energía de enlace del hueco con el átomo extrínseco.

El cálculo de la energía de enlace del hueco, de nuevo conduce al problema del átomo hidrogenoide, sólo que ahora, en torno al núcleo de carga negativa se mueve un hueco de carga positiva. El

papel de núcleo lo desempeña el átomo extrínseco juntamente con el electrón complementario capturado. Este último se convierte en un haz que forma el enlace entre los átomos y, por lo tanto, la zona en que se mueve no supera la distancia interatómica. Al mismo tiempo, el hueco está más débilmente enlazado con el átomo extrínseco. La distancia hasta el átomo donde se encuentra ese hueco, así como la energía de enlace, se determinan mediante las fórmulas (3) y (4). Sólo es necesario tener en cuenta que la masa eficaz del hueco, la cual ha de utilizarse en este caso, hablando en general, se distingue de la masa eficaz del electrón. Por lo común, ésta también es mucho menor que la masa del electrón libre, así que el átomo hidrogenoide de hueco también tiene dimensiones del orden de decenas de angström, mientras que su energía de enlace es del orden de varias centésimas de electrón-voltio.

A la temperatura de alrededor de 100 K, el movimiento térmico separa los huecos de los átomos extrínsecos, después de lo cual aquéllos comienzan a "vivir por sí mismos" y, si se aplica un campo eléctrico, ellos participarán en el transporte de la corriente.

Por lo tanto, los átomos extrínsecos de los elementos del tercer grupo son capaces de aceptar fácilmente un electrón y formar un hueco. Por eso ellos se llaman *aceptadores*.

Resumamos todo lo dicho. Los portadores móviles de la corriente se forman en los semiconductores solamente a expensas de la energía del movimiento térmico. Pero ellos también pueden formarse a expensas de la rotura de los enlaces del retículo. Para eso es necesario realizar un trabajo equivalente a la anchura de la rendija de energía E_g. En este caso aparecen simultáneamente un electrón y un hueco. Además, los mismos pueden ser generados de uno en uno al separarse del átomo extrínseco el electrón o el hueco. En vista de que la energía de enlace del electrón y del hueco con el átomo extrínseco es mucho menor que la anchura de la rendija de energía, la probabilidad de que el electrón se separe del átomo extrínseco es mucho mayor que la probabilidad de que se rompa cualquier enlace. Por otra parte, la concentración de átomos extrínsecos, por lo general, es muchos órdenes inferior a la concentración de átomos fundamentales. Por lo cual, al subir la temperatura, al principio se separan todos los portadores situados en las impurezas, en tanto que la concentración de los propios portadores (electrones y huecos que surgen al romperse los enlaces) es insignificante. Esta zona de temperaturas se denomina zona de conductibilidad por impurezas. No obstante, con el aumento posterior de la temperatura, la concentración de los propios portadores se compara con la de las impurezas y comienza a superarla. Esta zona llámase zona de conducción intrínseca.

La deducción más importante para la exposición ulterior consiste en que a temperaturas muy bajas, cuando la energía del movimiento térmico kT es pequeña en comparación con la energía de enlace de los electrones por impurezas, *en el semiconductor no hay portadores de ningún tipo, ni extrínsecos ni intrínsecos.* Los enlaces se encuentran allí donde deben estar, mientras que los electrones extrínsecos y los huecos se hallan localizados en torno a sus átomos. La electroconductibilidad del semiconductor en esta zona se reduce a cero bruscamente al bajar la temperatura. Por eso el semiconductor difiere del metal, en el que la concentración de portadores móviles se mantiene alta por mucho que baje la temperatura.

TRANSICIÓN A LA ELECTROCONDUCTIBILIDAD METÁLICA AL AUMENTAR LA CONCENTRACIÓN DE IMPUREZAS

Esta principal diferencia entre el semiconductor y el metal desaparece inesperadamente al aumentar la concentración de impurezas. Si dicha concentración supera cierto valor crítico de N_c, por mucho que baje la temperatura, la electroconductibilidad permanecerá relativamente alta y dependerá muy poco de la temperatura. La electroconductibilidad que se comporta de esa manera se denomina *metálica.* Esto no significa, ni mucho menos, que, según el orden de magnitud, la electroconductibilidad del semiconductor es comparable con la de los buenos metales. La electroconductibilidad de los semiconductores siempre es muchos órdenes inferior a la de los metales. La denominación refleja solamente el carácter de comportamiento de la electroconductibilidad a bajas temperaturas. *La transición a la electroconductibilidad metálica que sucede al aumentar la concentración de impurezas, llámase transición dieléctrico—metal o transición de Mott.*

Los experimentos han demostrado que la concentración crítica de impurezas N_c, con la cual se produce la transición de Mott, cambia considerablemente de un semiconductor a otro. Una buena estimación de la variable N_c puede ser obtenida con ayuda de la relación

$$N_c a_B^{*3} \approx 0{,}02. \tag{5}$$

Por ejemplo, en el germanio, $N_c = 10^{17}$, y en el silicio, $N_c = 3 \cdot 10^{18}$ cm^{-3}.

En el campo de los semiconductores aún no existe una teoría matemática satisfactoria de transición de Mott. Eso constituye uno

de los problemas más complicados de la física del sólido. Las consideraciones cualitativas consisten en lo siguiente.

Con arreglo a su estructura, los átomos extrínsecos se parecen a los elementos monovalentes del primer grupo de la tabla de Mendeléiev (H, Li, Na, K). Al igual que estos elementos, el átomo extrínseco tiene un solo electrón en la capa exterior. Cristalizándose, los elementos del primer grupo forman buenos metales. El hidrógeno forma un cristal molecular y es dieléctrico. Pero hay todas las razones para suponer que, al someterlo a alta presión, el mismo también se convierte en metal. (Hoy día en este campo se realiza un trabajo tan intenso, que él podría ser el tema de un libro independiente.)

Es absolutamente natural que los átomos extrínsecos hidrogenoides, al permanecer muy cerca uno de otro dentro del semiconductor, también sean capaces de formar un sistema metálico.

A primera vista parece extraño que eso pueda tener relación con la transición de Mott. En efecto, la concentración de átomos en el sodio metálico constituye alrededor de 10^{22} cm^{-3}, o sea, es aproximadamente 100 mil veces mayor que la concentración de impurezas en el germanio, con la cual ocurre la transición de Mott. Es evidente que con concentraciones tan bajas, el sodio no pueda ser metal.

Sin embargo, la metalización del sistema se determina no por la magnitud de la concentración, sino por el grado de recubrimiento de las capas electrónicas de los átomos inmediatos. Si los átomos se encuentran a una distancia tan grande, que las zonas del espacio donde se mueven sus electrones exteriores, permanecen muy alejadas una de otra, esos átomos serán simplemente átomos aislados. Pero si los núcleos de los átomos se hallan tan cerca uno de otro, que las zonas donde se mueven sus electrones exteriores permanecen recubiertas (sobrepuestas), esos átomos perderán su individualidad. Sus electrones exteriores "no pueden saber" a cuál de los núcleos pertenecen. En un sistema constituido por gran número de átomos ocurre la llamada socialización o colectivización de los electrones. Éstos forman un sistema independiente, capaz de conducir la corriente eléctrica. Tal sustancias es el metal.

Para los átomos hidrogenoides, la magnitud del recubrimiento se determina por el parámetro adimensional Na_B^{*3}. (La variable $^4/_3\pi N a_B^{*3}$ es el número medio de núcleos de átomos ubicados dentro de una esfera cuyo radio equivale al radio eficaz de Bohr.) Como ya fue dicho, gracias a que el átomo extrínseco se encuentra

dentro del semiconductor, su radio es anormalmente grande. Por tal razón, la condición (5) ya se cumple cuando $N = 10^{17}$ cm^{-3} (para el germanio).

De las consideraciones expuestas es fácil comprender por qué la transición de Mott en todos los semiconductores ocurre aproximadamente con el mismo valor del parámetro Na_B^{*3}, aunque las concentraciones críticas de N_c pueden variar mucho. ¡Pues precisamente este parámetro determina el recubrimiento de los átomos inmediatos!

Puede ser planteada la pregunta: ¿qué concentración de átomos debe poseer un cristal de hidrógeno para que el recubrimiento de sus átomos sea igual que el recubrimiento de los átomos extrínsecos que se encuentran en el semiconductor, con una concentración correspondiente a la transición de Mott? El recubrimiento se determina por la fórmula (5), pero ahora en ella es natural sustituir el radio de Bohr obtenido por la fórmula (1). En este caso obtendremos una concentración colosal, equivalente a 10^{23} cm^{-3}. Así pues, el recubrimiento correspondiente a la transición de Mott es muy grande.

Por eso no hay razones para asombrarse de que los átomos extrínsecos, con una concentración superior a N_c, formen un sistema metálico. Este hecho constituye la base de la teoría contemporánea de los semiconductores con gran concentración de impurezas.

TRANSICIÓN DE MOTT Y PROBLEMA DE LAS ESFERAS

La teoría de percolación propone una exposición simplificada de la transición de Mott, la cual toma en consideración el hecho de que las impurezas en el semiconductor se hallan dispuestas desordenadamente y pueden formar acumulaciones y enrarecimientos. Supongamos que en cierta zona, los átomos extrínsecos están dispuestos tan cerca uno de otro, que sus capas electrónicas permanecen muy recubiertas y sus electrones exteriores se socializan. Tal zona es un pedazo de metal; si a ésta le aplicamos diferencia de potencial, por ella fluirá corriente eléctrica.

Sin embargo, la existencia de tales zonas es insuficiente para que la muestra maciza se comporte como un metal. Si las zonas metálicas se encuentran rara vez, las mismas no se comunicarán una con otra, sino que sólo constituirán inclusiones metálicas aisladas en la sustancia que, a bajas temperaturas, es un dieléctrico. En general, tal sustancia se comporta como un dieléctrico.

Al aumentar la concentración de impurezas se incrementa el

espacio ocupado por las zonas metálicas y, con cierta concentración crítica N_c, las zonas metálicas formarán un sistema enlazado de "lagos y canales" que atraviesa todo el cristal del semiconductor. A partir de tal concentración, la electroconductibilidad de la muestra maciza adquiere carácter metálico.

Está claro que la enunciación matemática de las ideas antes expuestas debe estar enlazada con la teoría de percolación, pero el planteamiento de dicho problema no es fácil. La principal dificultad consiste en que no sabemos con qué concentración de impurezas una zona dada puede considerarse metálica.

El modelo elemental de transición de Mott, enunciado en los años sesenta, consiste en lo siguiente. Imaginémonos que cada átomo extrínseco es una bola metálica con cierto radio r_0. Esas bolas pueden penetrar una en otra (fig. 34, *a*), es decir, las zonas o espacios ocupados por ellas pueden recubrirse. Las bolas forman cadenas (fig. 34, *b*) y zonas de una configuración más complicada, las cuales, según la definición, se consideran metálicas. Es necesario hallar la concentración de bolas N_c, partiendo de la cual las zonas metálicas aseguran la electroconductibilidad de la muestra maciza.

¿A partir de qué razonamientos debemos elegir el radio r_0? El átomo extrínseco hidrogenoide no tiene límites evidentes. La probabilidad de hallar el electrón a una distancia r del núcleo, disminuye al aumentar r según la ley e^{-2r/a_B^*}, donde $e = 2{,}718$ es la base del logaritmo natural. La probabilidad de encontrar el electrón cuando $r = a_B^*/2$ es, 7 veces menor que cuando $r = 0$; cuando $r = a_B^*$ es 7,4 veces menor que cuando $r = 0$; y cuando $r = 1{,}5a_B^*$ es 20 veces menor. Se puede decir con seguridad, que el radio eficaz del átomo debe ser proporcional a la longitud a_B^*:

$$r_0 = qa_B^*. \tag{6}$$

Ésta es una afirmación muy importante, la cual significa que el coeficiente numérico q debe poseer cierta universalidad: éste

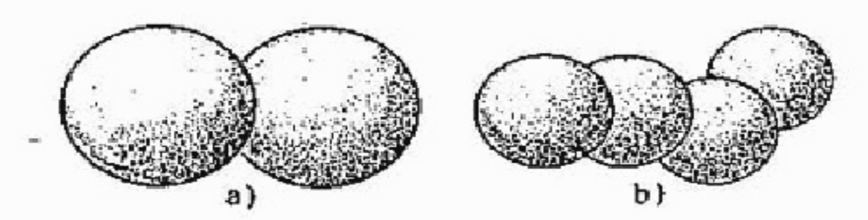


Fig. 34. *a*) Esferas recíprocamente recubiertas, que representan átomos con electrones socializados; b) cadena de esferas recíprocamente recubiertas, que es un canal metálico por el que puede fluir la corriente eléctrica.

varía relativamente poco al pasar de un semiconductor a otro, mientras que la magnitud a_B varía mucho.

A base de cualesquiera consideraciones físicas es muy difícil calcular de antemano la variable q. La vía más fácil consiste en hallar, dentro de los límites del modelo antes enunciado, la concentración crítica N_c correspondiente a la transición de Mott. Esta concentración será expresada por el radio de la bola r_0. Después, utilizando la fórmula (6) es necesario expresar N_c a través de q y a_B. De acuerdo con los datos experimentales, la variable N_c se determina mediante la fórmula (5). Comparando teóricamente la expresión con la fórmula (5) es posible obtener la variable q, es decir, esta última puede ser determinada a partir de los datos experimentales.

Pasemos a la realización de dicho programa. Hay que resolver el siguiente problema de la teoría de percolación. En el espacio tridimensional se han construido bolas de radio r_0, cuyos centros se hallan distribuidos en el espacio desordenadamente y, por término medio, de forma uniforme. El número medio de centros de bolas, correspondiente a la unidad de volumen, es igual a N. Dos bolas se consideran enlazadas si ellas se recubren mutuamente (fig. 34, *b*). Es preciso hallar el valor crítico de la concentración N_c que provoca la percolación por las bolas capaces de recubrirse, es decir, que contribuye a la formación de vías que atraviesan todo el sistema y que constan de bolas capaces de recubrirse (fig. 34, *b*).

Este problema difiere del de las esferas, enunciado en el capítulo anterior, por el hecho de que en el segundo se consideraban enlazadas no las esferas capaces de recubrirse, sino las esferas entrelazadas, es decir, aquellas cuyos centros se encuentran a una distancia inferior a r_0 y no a $2r_0$. Tal diferencia, no obstante, es poco importante, o sea, los resultados de un problema pasan fácilmente a otro. En efecto, si con cierta concentración de centros existe una vía infinita por las esferas entrelazadas de radio $2r_0$, también existirá una vía por las esferas de radio r_0 capaces de recubrirse. Ésta es simplemente la misma vía, es decir, la vía que pasa por los mismos centros. En la figura 35 esa idea se ilustra para el caso del problema plano. (Es fácil entender qué aspecto debe tener el correspondiente dibujo para el problema tridimensional.) Si *no hay* vía por las esferas entrelazadas de radio $2r_0$, *tampoco la habrá* por las esferas de radio r_0 capaces de recubrirse. De aquí se deduce que la concentración crítica correspondiente al umbral de percolación por las esferas entrelazadas de radio $2r_0$, es igual a la concentración crítica correspondiente al umbral de percolación por las esferas de radio r_0 capaces de recubrirse.

8 437

De acuerdo con los resultados del capitulo anterior, la concentración crítica para la percolación por las esferas entrelazadas de radio $2r_0$ se determina con arreglo a la condición

$$\frac{4\pi}{3} N_c(2r_0)^3 = B_c \approx 2,7. \quad (7)$$

Sustituyendo la expresión (6) en la (7) obtenemos

$$N_c a_B^{*3} = \frac{0,008}{q^3}. \quad (8)$$

El coeficiente q ahora puede ser hallado comparando la expresión (8) con la (5) obtenida de los datos experimentales. Para que estas expresionas coincidan es necesario suponer que $q = 1,6$. Por consiguiente, el radio eficaz r_0 es igual a $1,6a_B^*$. La probabilidad de hallar el electrón en el punto situado a la distancia $r = r_0$ del núcleo es 24 veces menor que en el punto $r = 0$.

Lo más importante en esta descripción de la transición del dieléctrico al metal, por supuesto no es el cálculo de la variable q que determina el radio eficaz del átomo, sino el hecho de que la teoría de percolación permite suponer cómo está estructurado el semiconductor con una concentración de impurezas próxima a N_c.

Si la descripción propuesta es correcta, en el semiconductor habrá un sistema de canales metálicos que atraviesa por completo dicho semiconductor. La corriente eléctrica fluye por esos canales al igual que por cables conductores. Como será mostrado en la tercera parte del libro, el volumen del semiconductor ocupado por tales canales es muy pequeño si la concentración de impurezas es

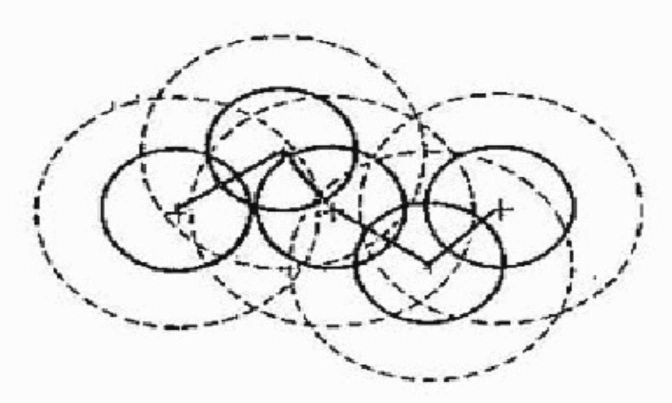


Fig. 35. Las lineas de trazos muestran una cadena de circunferencias entrelazadas, de radio $2r_0$. Los centros de dichas circunferencias están marcados con cruces. La via de percolación por los centros se indica con una linea quebrada. Por esos mismos centros pasa la via de percolación a través de las circunferencias recíprocamente recubiertas, de radio r_0.

próxima a N_c. Con esto se hallan relacionadas las propiedades específicas de la electroconductibilidad y otras características importantes del semiconductor.

EJERCICIO

1. El antimoniuro de indio (In Sb) es un semiconductor con una rendija muy estrecha (0,18 eV a temperatura ambiente). Las masas eficaces de tales semiconductores también son pequeñas. Considerando que la masa eficaz m^* del electrón es igual a 0,015 m, y que la constante dieléctrica $\varepsilon = 18$, calculen el radio de Bohr eficaz a_B y la concentración crítica N_c correspondiente a la transición de Mott: dieléctrico–metal.

Capítulo 9
DIVERSAS GENERALIZACIONES DEL PROBLEMA DE LAS ESFERAS

FIGURAS ENTRELAZADAS DE FORMA ARBITRARIA

Como ya fue dicho, el movimiento del electrón en el cristal se describe por la llamada masa eficaz m^*, la cual puede distinguirse considerablemente de la masa del electrón libre, es decir, de la masa del electrón situado en el vacío. Resulta que la masa eficaz puede diferenciarse de la masa del electrón libre no sólo por su valor. El asunto es que en el cristal no todas las direcciones son equivalentes. Por ejemplo, el carácter de movimiento del electrón a lo largo de las aristas del cubo puede distinguirse del carácter de su movimiento a lo largo de las diagonales de ese cubo y de las diagonales de sus caras. Por eso la masa eficaz puede ser distinta en direcciones diferentes. Entonces la zona donde el electrón se mueve en entorno al átomo donador, ya no tendrá forma de bola. La misma puede ser un elipsoide o una figura aún más complicada.

Por este motivo, el problema de las esferas fue generalizado para el caso de figuras de forma arbitraria. El nuevo problema se enuncia así: se dan los nudos distribuidos en el espacio de modo desordenado pero, por término medio, uniformemente. La concentración de nudos es igual a N. En torno a cada uno de ellos se ha construido una misma superficie cerrada de forma arbitraria.

Las superficies construidas en torno a distintos nudos no sólo son idénticas por su forma, sino que permanecen igualmente orientadas en el espacio. Si, por ejemplo, las superficies tienen

forma de pez, las colas de todos los peces deben estar orientadas hacia un mismo lado.

El volumen que se encuentra dentro de una superficie es igual a V. Dos nudos se consideran enlazados entre sí, si uno de ellos está dentro de la superficie construida en torno al otro (superficies entrelazadas). Hay que hallar el valor crítico de la concentración N, con el que surge percolación por los nudos enlazados.

Al igual que en el problema de las esferas, la presencia o la falta de percolación sólo se determina por el valor del parámetro B, que es el producto VN o el número medio de nudos situados en un volumen limitado por una sola superficie. Ese número no cambia al aumentar o disminuir las escalas a lo largo de las tres direcciones, es decir, al multiplicar o dividir las coordenadas de todos los nudos del sistema y de todos los puntos situados en las superficies, por un mismo número. También está claro que tal cambio de las escalas no eliminará la percolación, si ésta existe, y no la generará. Por lo tanto, la percolación "no reacciona" a las modificaciones de N y V con las que no cambia la magnitud B. Por eso, al igual que en el problema de las esferas, es conveniente hablar no de la concentración crítica N_c, sino del valor crítico del parámetro B:

$$B_c = N_c V. \qquad (1)$$

Si, por ejemplo, sin cambiar la forma de la superficie construida en torno a cada nudo, se procede a aumentar el volumen V limitado por esa superficie, por ejemplo, dos veces, la concentración crítica N_c también disminuirá dos veces, pero el parámetro B_c no cambiará. Este último sólo depende de la *forma* de la superficie.

La fórmula (1) generaliza la fórmula

$$B_c = {}^4/_3 \pi N_c R^3 \qquad (2)$$

utilizada anteriormente en el problema de las esferas.

En un caso general, el valor crítico de B_c, con el que surge percolación, no debe coincidir con el valor de $B_c = 2{,}7$ obtenido para el problema de las esferas. La cuestión de los valores de B_c para distintas figuras, hoy día se estudia intensamente.

PROBLEMA DE LOS ELIPSOIDES

Los científicos soviéticos Ya. G. Sinai y B. I. Shklovski han demostrado que algunas superficies diferentes tienen el mismo valor de B_c. En particular, tales superficies son el elipsoide y la esfera (y en el caso plano, la elipse y la circunferencia).

Al principio recordemos qué es una elipse y un elipsoide. Llámase elipse la curva cerrada representada en el plano, que se obtiene de una circunferencia al estirarla (o comprimirla) a lo largo de uno de sus ejes (fig. 36). Para realizar el estiramiento o la compresión es preciso transformar cada punto M situado en la circunferencia y que tiene las coordenadas x, y en el punto M' con coordenadas $x' = kx$, $y' = y$, donde k es el coeficiente de estiramiento ($k > 1$ corresponde al estiramiento, y $k < 1$, a la compresión).

La superficie que se obtiene de una esfera al estirarla (o al comprimirla) a lo largo de uno de sus ejes, se denomina elipsoide de revolución. Para efectuar el estiramiento o la compresión a lo largo del eje z hay que transformar cada punto situado en la esfera y que tiene las coordenadas x, y, z, en un punto con coordenadas $x' = x$, $y' = y$, $z' = kz$. El cuerpo que así se obtiene se muestra en la figura 37. El mismo se llama elipsoide de revolución, ya que pasa a sí mismo al girarlo a cualquier ángulo en torno al eje z (llamado eje de rotación). Y si lo cortamos con un plano que pase por el eje z, en el corte obtendremos una elipse. El corte con un plano perpendicular al eje z, proporcionará una circunferencia.

El elipsoide de forma general se obtiene del elipsoide de revolución estirándolo (o comprimiéndolo) a lo largo de uno de sus ejes perpendiculares al eje de revolución. El nuevo coeficiente de estiramiento puede distinguirse de k. El corte del elipsoide de forma general, con cualquiera de los planos paralelos a los planos xOy, xOz, yOz, proporciona una elipse.

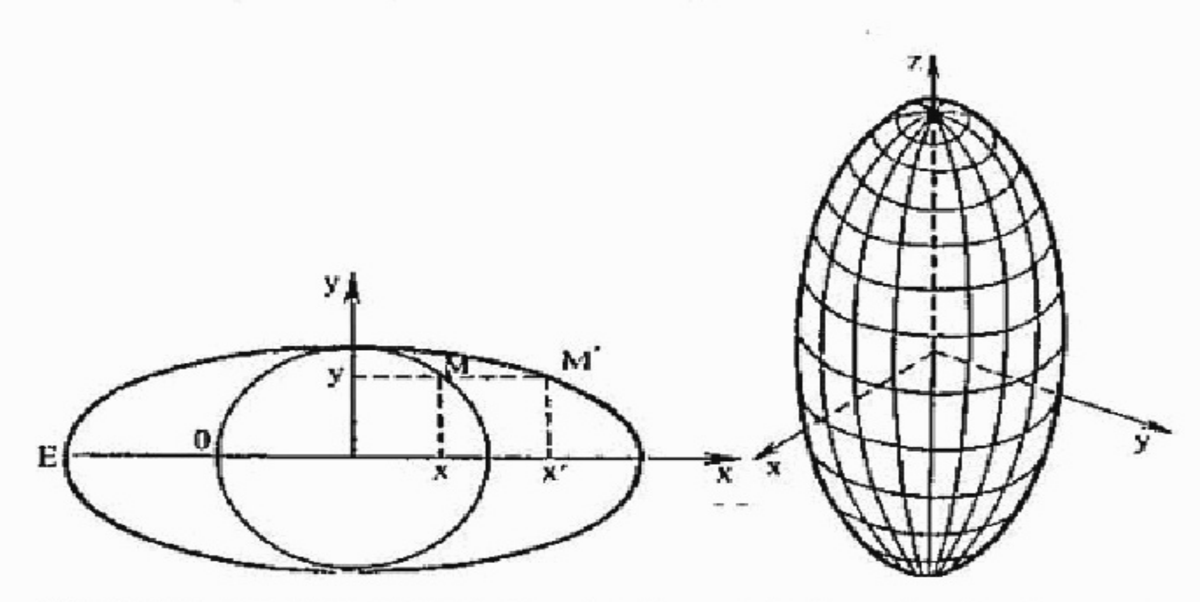


Fig. 36. Elipse E obtenida de la circunferencia O al estirarla a lo largo del eje x.

Fig. 37. Elipsoide de revolución.

Demostremos ahora que los valores de B_c para los elipsoides y las esferas son idénticos. Supongamos que han sido establecidos los nudos distribuidos desordenadamente en el espacio, con una concentración media igual a N. En torno a cada nudo se ha construido una esfera de radio R. Si $B = {}^4/_3 \pi N R^3 > B_c^{esf}$, entonces habrá percolación por las esferas y, al cumplirse la desigualdad inversa, no habrá percolación por las esferas. Aquí B_c^{esf} es el valor crítico de B para el problema de las esferas ($B_c^{esf} = 2{,}7 \pm 0{,}1$).

Realicemos el estiramiento a lo largo de los ejes z y x según la ley $y' = y$, $x' = k_1 x$, $z' = k_2 z$, de tal modo que a dicha transformación se sometan tanto las coordanadas de los nudos como las de los puntos situados en las esferas. (Si se tratara de un problema plano, podríamos suponer que los nudos y las circunferencias se trazaron sobre una cinta de goma que después fue estirada en una dirección. De modo análogo podemos imaginarnos un "espacio de goma" tridimensional, dentro del cual están marcados los puntos que representan los nudos y las superficies de las esferas. Luego ese "espacio de goma" se estira en dos direcciones.)

Si las coordenadas x de los nudos son números aleatorios distribuidos uniformemente en el intervalo de 0 a L, donde L es el tamaño del sistema, las nuevas coordenadas x' obtenidas al multiplicar por k_1, también serán números aleatorios distribuidos con uniformidad en el intervalo de 0 a $k_1 L$. Las coordenadas z' están distribuidas uniformemente en el intervalo $(0, k_2 L)$, y las coordenadas y no han cambiado. La concentración de nudos N' comenzó a distinguirse de la concentración N.

Todas las esferas se han transformado en elipsoides de volumen V'. (Se puede mostrar que $V' = k_1 k_2 \cdot 4/3 \pi R^3$. Pero para las conclusiones ulteriores eso no tiene importancia.) Por eso, como resultado, del problema de las esferas se ha obtenido el problema de los elipsoides. Para este último hay que introducir la variable $B' = N'V'$ y hallar el valor crítico de B' con el que surge percolación por los elipsoides. Designemos ésta por B_c^{el}.

La demostración ulterior se divide en los siguientes puntos:

1. $B = B'$. Todos los nudos que antes de la transformación se encontraban dentro de cierta esfera, después de la transformación resultan dentro del elipsoide obtenido de dicha esfera. En efecto, si ésta se estira (o se comprime), entonces, en cualquier etapa del estiramiento, los puntos interiores respecto a ella siguen siendo interiores, y los exteriores se mantienen exteriores. Por consiguiente, el número medio de nudos B que antes de la transformación se encontraban dentro de una esfera, equivale al

número medio de nudos B' que después de la transformación permanecen dentro de un elipsoide.

2. Si $B > B_c^{esf}$, entonces $B > B_c^{el}$, (3)

Si $B < B_c^{esf}$, entonces $B < B_c^{el}$. (4)

Efectivamente, si antes de la transformación, dos esferas estaban enlazadas, es decir, si el centro de una de ellas se encontraba dentro de la otra, los dos elipsoides obtenidos de ellas también permanecerán enlazados, ya que a causa de la transformación, los puntos interiores seguirán siendo interiores, y los exteriores, exteriores. Si dos esferas no estaban enlazadas, los elipsoides obtenidos de ellas tampoco lo estarán. De aquí se deduce que si $B > B_c^{esf}$, es decir, si existen vías infinitas de percolación por las esferas enlazadas, también existirán vías infinitas de percolación por los elipsoides enlazados, lo cual, a su vez, significa que B' es mayor que el valor de umbral B_c^{el}. Como $B' = B$, de aquí obtenemos la condición (3). Si $B < B_c^{esf}$, es decir, si no existe percolación por las esferas enlazadas, tampoco existirá percolación por los elipsoides enlazados, es decir, $B' < B_c^{el}$. De aquí se deduce la condición (4).

3. Como las condiciones (3) y (4) deben cumplirse con cualquier valor de B, de ellas se deduce que $B_c^{esf} = B^{el}$, lo cual era necesario demostrar.

OTRAS SUPERFICIES

El problema de los elipsoides tiene mucha importancia para la física de los semiconductores, sin embargo, en una serie de casos ese problema no es suficiente. Por eso los físicos querían saber cómo el valor crítico de B_c depende de la forma de la superficie en los casos cuando no hay relaciones exactas. Con este fin se realizaron cálculos en un ordenador, según el método de Montecarlo, los cuales demostraron un hecho extraordinario y muy importante: B_c depende muy poco de la forma de la superficie.

Se estudiaron las figuras que tenían forma de cubo y de tetraedro. Resultó que, dentro de los límites de precisión del cálculo ($\pm 0{,}1$), los valores críticos de tales figuras no se distinguen ni entre sí, ni del valor de B_c para el problema de las esferas. Se trató hallar la figura lo menos "parecida" a una esfera. En calidad de la misma fue elegida "la cruz tridimensional", es decir, la figura formada por tres paralelepípedos extendidos que se cruzan en el origen de coordenadas (fig. 38). Resultó que para tal superficie, el

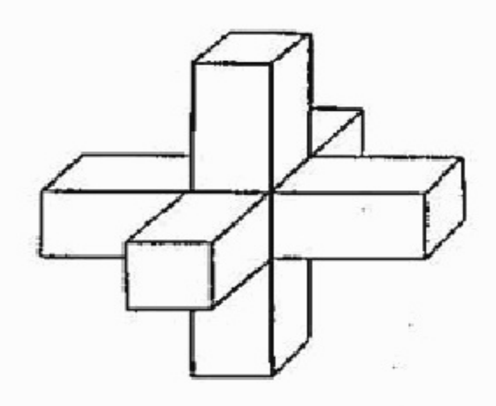


Fig. 38. "Cruz tridimensional".

valor de B_c es tan sólo en un 20% menor que para la esfera.

Eso mismo fue aclarado para las figuras planas. Las investigaciones han mostrado que el valor de B_c para los cuadrados difiere tan sólo en un 2% del valor de B_c para las circunferencias.

Así pues, en la clase de figuras de una dimensión (es decir, ora planas, ora tridimensionales), el valor de B_c es universal con buena precisión. Puede ser que detrás de esto se oculten ciertas relaciones semejantes a la demostrada en el apartado anterior, y allí donde los cálculos en el ordenador revelen poca diferencia, o no revelen diferencia dentro de los límites de precisión, en realidad tendrán lugar igualdades estrictas. (En cuanto a las diferencias débiles obtenidas mediante el ordenador, éstas han de interpretarse de manera crítica, ya que no siempre es fácil apreciar correctamente la precisión de los resultados.) Por desgracia, salvo lo dicho, actualmente no se sabe nada más.

UN EXPERIMENTO MÁS EN LA COCINA CASERA Y PROBLEMA DE LAS ESFERAS SÓLIDAS

En 1974 tres estudiantes de la Universidad de Harvard (EE.UU.) realizaron el siguiente experimento sencillo. En un recipiente colocaron 5000 pequeñas bolas, parte de las cuales eran de aluminio, y otras de plástico. Las mismas fueron minuciosamente mezcladas de antemano. El recipiente se sacudió bien para lograr la máxima compactación de las bolas. En el fondo del recipiente se encontraba un electrodo en forma de hoja metálica, encima se instaló otro electrodo y todo ese sistema fue comprimido mediante una carga de 15 kg.

El aluminio es un buen metal, pero el plástico es un dieléctrico. El objeto de este experimento consistía en hallar la porción crítica x_c de bolas de aluminio, con la cual surge corriente entre los

electrodos, es decir, surgen vías por las bolas de aluminio que rozan una con otra. Resultó que $x_c \approx 0,25$.

Además, el experimento permitió investigar la electroconductibilidad del sistema en función de x cuando $x > x_c$.

Se trata de un problema más de percolación, es decir, *del problema de las esferas sólidas*. El problema de los nudos quizás sea el más parecido a este nuevo problema. Recordemos la construcción examinada en el capitulo 6 con motivo de la estimación aproximada del umbral de percolación del problema de los nudos. En torno a cada nudo del retículo se construye una esfera de radio igual a la mitad de la distancia hasta el nudo inmediato. Las esferas construidas en torno a los nudos blancos se llaman esferas blancas, y las construidas en torno a los nudos negros, esferas negras. La percolación por los nudos blancos es equivalente a la existencia de vías por las esferas blancas que rozan una con otra (véase la fig. 31).

La diferencia entre el problema de los nudos y el problema nuevo consiste en que en el primero, los centros de las esferas son los nudos del retículo regular, y en el segundo, los centros de las esferas pueden encontrarse por doquier. Más adelante se muestra que esa diferencia no es muy importante.

La diferencia entre el problema nuevo y el de las esferas, examinado en los capítulos anteriores y en los apartados anteriores de este capítulo, consiste en que las esferas que figuran en el nuevo problema se estima que son sólidas: éstas no se recubren una con otra. Tal diferencia es muy importante.

En el capítulo 6 se muestra que en el caso del problema de los nudos, la percolación por los nudos blancos surge cuando una parte del espacio, llena de bolas construidas en torno a esos nudos, es igual a 0,16 aproximadamente. Resultó que el referido número casi no depende del tipo de retículo. Es natural suponer que si el mismo casi no depende del tipo de retículo, entonces ese número no debe depender mucho de *si hay, en general, retículo*. Si esto es correcto, la parte del volumen llena de bolas metálicas, con la cual por dichas bolas surge percolación, ha de ser igual a 0,16 aproximadamente.

Al igual que en el capítulo 6, designemos por f el coeficiente de relleno, es decir, la parte del volumen ocupada por todas las bolas de aluminio y de plástico. Por definición, la variable x es la relación entre el número de bolas de aluminio y el número total de bolas. Por este motivo, la parte del volumen ocupada por las bolas de aluminio es igual a fx. Si en el umbral de percolación esta parte del volumen es igual a 0,16, entonces el valor crítico de x_c puede ser hallado de la condición $fx_c = 0,16$.

El coeficiente de relleno para el sistema de bolas bien compactadas, pero desordenadamente dispuestas, es bien conocido. Semejante sistema es conocido por la humanidad desde tiempos antiguos. Cuando era necesario medir cierta cantidad de trigo o de cualquier otra mercancía árida, ésta se echaba en un recipiente especial (*medida*), se sacudía y se compactaba. En la ciencia contemporánea, ese sistema sirve como modelo de disposición de los átomos en *los metales amorfos*. Estos metales, también conocidos con el nombre de vidrios metálicos, son sustancias dotadas de electroconductibilidad metálica, pero sin estructura metálica. Resultó que la disposición de los átomos en el metal amorfo recuerda mucho la disposición de las bolas incompresibles bien compactadas. Gracias a esto, las propiedades de las bolas dispuestas desordenadamente y bien compactadas se estudiaban con mucha minuciosidad (principalmente con ayuda de un ordenador). Se aclaró que la parte del volumen ocupada por las bolas es igual a $f = 0{,}637$.

Volvamos al problema de la percolación por las bolas metálicas. Tras determinar x_c por la fórmula $x_c = 0{,}16/f$, obtenemos $x_c = 0{,}25$, lo cual coincide con el resultado obtenido por los tres estudiantes.

Posteriormente los experimentos para determinar el umbral de percolación se repetían con mucha frecuencia utilizando una técnica más moderna. Se realizaban experimentos en los que figuraba una mezcla de bolas de *diversos* radios. En esta mezcla también cambiaban, dentro de amplios límites, los radios de las bolas metálicas y dieléctricas. Resultó que en este caso la parte crítica del volumen fx_c es igual a 0,17 aproximadamente, y no difiere, dentro de los límites de precisión, del experimento con bolas de un mismo radio.

Así pues, el umbral de percolación en el problema de las esferas sólidas puede ser apreciado con relativa facilidad considerando que la parte crítica del volumen llena de bolas metálicas es igual a 0,16 aproximadamente. Cabe señalar que en el problema de las esferas que se recubren, ese número es mucho mayor.

El problema de las esferas sólidas resultó muy importante desde el punto de vista de su aplicación. El mismo es la base de la teoría de los materiales heterogéneos, que son dieléctricos con pequeñas inclusiones metálicas. En la actualidad tales materiales se estudian ampliamente. Ellos se fabrican y se utilizan tanto en forma de películas finas como en forma de muestras volumétricas (tridimensionales). Cerca del umbral de percolación, dichas sustancias poseen propiedades eléctricas extraordinarias. Por ejemplo, la capacidad de un condensador lleno de tal material

crece ilimitadamente si la parte del volumen ocupada por el metal se aproxima al umbral de percolación. Tal fenómeno está relacionado con la capacidad recíproca anómala de los grandes racimos metálicos. Hoy día la descripción de las propiedades eléctricas de los materiales heterogéneos se convierte en un apartado independiente de la teoría de percolación.

Capítulo 10
NIVEL DE PERCOLACIÓN

"DILUVIO UNIVERSAL"

Seis días y siete noches reinaba la tormenta,
El Diluvio espantoso cubría la Tierra,
Al amanecer del séptimo día, entre la tormenta
y el Diluvio cesó la guerra,
Habíase ya calmado la tempestad de viento y
agua – se terminó el Diluvio.
Habrí el respiradero – la luz me dio en la cara,
Miré al mar – el silencio advino.
¡Y vi que toda la humanidad estaba convertida en limo!
Haciéndose un techo plano la llanura.

Así describe el Diluvio Universal el mito sumérico de Guilgamesh, una de las obras literarias más antiguas, que remonta aproximadamente a la época del segundo milenio antes de nuestra era (traducción del ruso por Stanislav N. Belosúsov).

Cuando el agua comenzó a menguar, sobre su superficie aparecieron las montañas más altas de la Tierra. El agua bajaba cada vez más y más hasta alcanzar su nivel habitual. Imagínense un cuadro grandioso: un enorme sistema montañoso, por ejemplo, el Tian-Shan, que sale poco a poco del agua. Al principio aparecieron, como islas, las cumbres más altas, después las zonas de prados alpinos y, por último, el agua descendió hasta el pie de las montañas.

Supongamos que nos interesa la siguiente cuestión: ¿hasta qué nivel debe bajar el agua para que desaparezca la última vía acuática que atraviesa todo el sistema montañoso (fig. 39)? Por supuesto que tal vía existirá hasta que cierta parte de los puertos montañosos salgan del agua, y después la misma desaparecerá.

La figura 40 ilustra el mapa geográfico de un sistema montañoso en el que, mediante líneas finas se muestran las curvas de nivel (líneas que unen todos los puntos que tienen la misma altura en el terreno). Las líneas gruesas son las curvas

correspondientes al nivel del agua. Ellas separan el agua de la tierra firme. Los sectores cubiertos de agua, en la figura están rayados. La figura 40, *a* ilustra el comienzo del Diluvio: los lagos de agua aún no se comunican uno con otro. Después el agua subió más, y en la figura 40, *b* ya han surgido vías acuáticas que cruzan todo el sistema. En la figura 40, *c*, del agua sólo sobresalen algunas cimas montañosas.

El nivel del agua con el que aparece (o desaparece) la vía acuática, se llama *nivel de percolación*. Su determinación constituye un problema plano de la teoría de percolación. El mismo también puede ser enunciado de otra manera. Supongamos que el plano ha sido pintado caóticamente con pintura blanca y negra. Admitamos que una parte del área pintada de color blanco es igual a x. Con pequeños valores de x, los pedazos blancos forman manchas aisladas, mientras que con valores de x cercanos a la unidad, al revés, permanecen aislados los pedazos negros. Hay que hallar el



Fig. 39. Viaje durante el Diluvio.

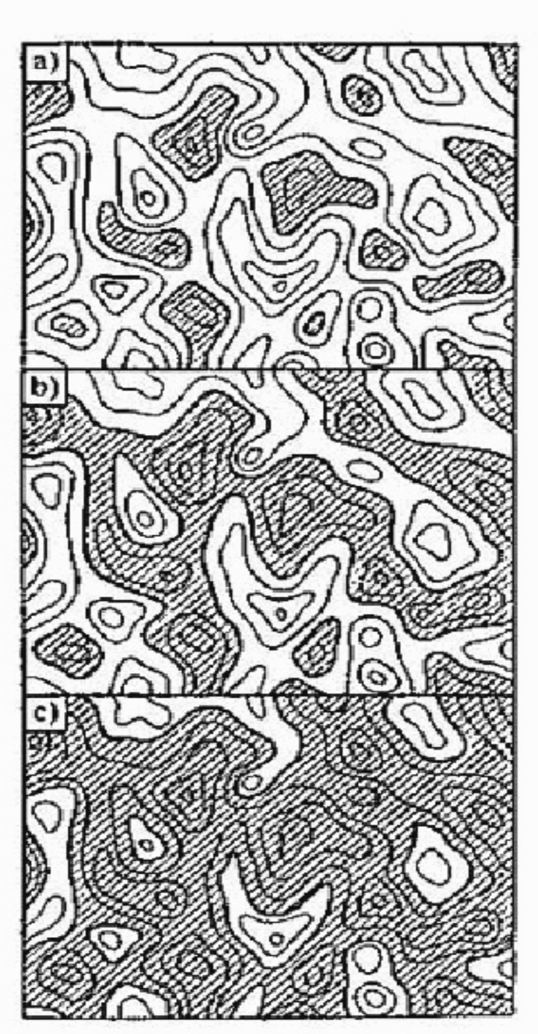


Fig. 40. Mapa de un sistema montañoso cubierto de agua. Las regiones inundadas están rayadas.

valor crítico de x con el que desaparece (o aparece) la vía que atraviesa todo el sistema y que sólo pasa por las zonas blancas.

De modo análogo también puede ser enunciado el problema volumétrico (tridimensional), tras llenar un gran volumen con sustancia blanca y negra. Después es preciso cambiar parte del volumen llenado con una de las sustancias, hasta que en el mismo surja percolación.

CONSTRUCCIÓN DE UNA FUNCIÓN ALEATORIA**

El nuevo problema no es reticular. Analicemos su enunciación matemática en un caso plano. Hay que establecer en todo el plano *la función aleatoria* $V(X, Y)$, donde X e Y son las coordenadas. En el problema del "Diluvio Universal", esta función es la altura sobre el nivel del mar en un punto de la superficie terrestre con coordenadas determinadas. Limitémonos al caso de *las funciones aleatorias gaussianas* (llamadas en honor al gran matemático C. Gauss).

La manera más sencilla para construir una función aleatoria gaussiana consiste en anotar cada punto del espacio con un número aleatorio que no esté de ningún modo enlazado con el número aleatorio inmediato. Tal función aleatoria se denomina "ruido blanco". Sus valores en los puntos vecinos se diferencian considerablemente, o sea, la misma es una función discontinua. Para obtenerla, el ruido blanco "se suaviza". Este procedimiento consiste en que a cada punto del espacio se le atribuye una variable que es el valor medio de los valores adoptados por la función de "ruido blanco" en cierta zona del espacio circundante a un punto dado. Precisamente esas variables forman una función aleatoria continua. Al pasar al punto inmediato, los valores de la función cambian muy poco, puesto que también cambia muy poco la zona del espacio en la cual es promediado el ruido blanco. Designemos por r_0 la dimensión de la zona del espacio en la que ocurre tal promediación. Esta dimensión se llama *radio de correlación* de la función aleatoria. Su propiedad principal consiste en que cuando varía el argumento de la función en un valor pequeño en comparación con r_0, el valor de la propia función cambia muy poco.

Se puede introducir la función de distribución de las variables V. Designémosla por $f(V)$. Según la definición, la probabilidad de que en un punto del espacio, elegido al azar, la función $V(X, Y)$ tenga el valor contenido en el estrecho intervalo desde V_1 hasta $V_1 + \Delta V$, es igual a $f(V_1)\Delta V$.

La función $V(X, Y)$ siempre puede ser construida de tal modo que su valor medio, en todos los puntos del plano, sea igual a cero. Para esto, al construir la función de "ruido blanco", es necesario utilizar los números aleatorios distribuidos simétricamente respecto a cero. Puede ser mostrado que la función $V(X, Y)$, obtenida con arreglo a tal función de "ruido blanco", posee una distribución gaussiana (véase el capitulo 2) del tipo

$$f(V) = \frac{1}{\delta\sqrt{2\pi}} e^{-V^2/2\delta^2}. \qquad (1)$$

Notemos que la densidad de la relatividad (1) es simétrica respecto a los valores positivos y negativos de V. En el "lenguaje de las montañas" eso significa que los picos y las depresiones se encuentran con igual probabilidad.

Ahora es fácil enunciar el problema de percolación. Las curvas de nivel expuestas en la figura 40 son determinadas por la condición $V(X, Y) = \text{const}$. Para establecer el nivel del agua hay que introducir el número t, que varia en el intervalo de $-\infty$ a $+\infty$. Los sectores del plano, en los que $V(X, Y) < t$, serán llamados sectores blancos (cubiertos de agua), y los sectores donde $V(X, Y) > t$, recibirán el nombre de sectores negros (sobresalientes del agua). Las líneas gruesas en la figura 40 son determinadas por la condición $V(X, Y) = t$.

Llámase nivel de percolación el valor crítico t_c con el que las zonas blancas forman vías que atraviesan todo el sistema. También se puede hablar de la parte crítica del espacio x_c, llena de zonas blancas en el momento de surgimiento de percolación. Esta parte del espacio equivale a la probabilidad de que la variable aleatoria continua V adopte cualesquier valores en el intervalo $-\infty < V < t_c$. Según el sentido de la función de distribución,

$$x_c = \int_{-\infty}^{t_c} f(V)\, dV. \qquad (2)$$

La fórmula (2) enlaza la parte crítica del espacio x_c con el nivel de percolación t_c.

ANALOGÍA CON EL PROBLEMA DE LOS NUDOS**

Imagínense que en el mapa geográfico mostrado en la figura 40 ha sido trazada una red plana (no importa cuál) de pequeño período. Admitamos que este último es mucho menor que las dimensiones características de las zonas de la tierra firme y del agua. Llamemos blancos los nudos de la red ubicados en las zonas

cubiertas de agua, y negros, los nudos situados en la tierra firme. Al igual que en el problema ordinario de los nudos, consideraremos que los nudos blancos permanecerán enlazados si ellos son nudos inmediatos. La parte crítica de la superficie llena de agua equivale a la cantidad crítica de nudos blancos con la cual surgirá la percolación por esos nudos.

Sin embargo, el nuevo problema no es idéntico al de los nudos. Recordemos el capítulo 4 donde se describió detalladamente la construcción del sistema de nudos blancos y negros. (En aquel capítulo los nudos se denominaban bloqueados y no bloqueados.) Un momento importante en esta construcción era el hecho de que cada nudo se convertía en blanco o en negro a voluntad del generador de números aleatorios y sin que tuviera importancia el color de los nudos inmediatos. Por esta causa los nudos blancos y negros fueron bien mezclados unos con otros. En el nuevo problema eso no es así ni mucho menos. En vista de que el período de la red es muy pequeño, los nudos negros y blancos se sitúan en forma de grandes bloques. El más cercano al nudo blanco será, con máxima probabilidad, un nudo blanco, y el más cercano al nudo negro será un nudo negro. (Las dimensiones de los bloques se determinan con arreglo al radio de correlación r_0.)

Se debe comprender que la introducción de una red en el problema del nivel de percolación es un procedimiento puramente formal. En realidad ese problema no es reticular y sus soluciones no deben depender ni del período de la red (si el mismo es bastante pequeño), ni del tipo de ésta. No obstante, tal procedimiento permite utilizar el aparato bien elaborado de los problemas reticulares.

En el capítulo 4 fue expuesto el algoritmo de solución del problema de los nudos por el método de Montecarlo, valiéndose de un ordenador. Este algoritmo se transfiere completamente al problema del nivel de percolación. Mediante ese mismo procedimiento, descrito en el capítulo 4, con ayuda de la función aleatoria $V(X, Y)$ se forma el bloque $K(X, Y)$ integrado por ceros y unidades. A los nudos blancos les corresponden las unidades, y a los negros, los ceros. Mediante ese mismo procedimiento se realiza la búsqueda de vías de percolación y se determina la parte crítica del espacio, con la cual surge percolación.

NIVELES DE PERCOLACIÓN EN LOS PROBLEMAS PLANO Y TRIDIMENSIONAL**

El problema plano tiene solución exacta si las propiedades de la función aleatoria $V(X, Y)$ son por término medio simétricas al

valor $V=0$. En particular, las funciones gaussianas descritas anteriormente poseen tales propiedades.

Para obtener una solución exacta hay que utilizar la enunciación simétrica del problema de percolación expuesto en el capítulo 5. Al igual que antes, llamaremos blancas las zonas donde $V(X, Y) < t$, y negras, las zonas donde $V(X, Y) > t$. Salvo el nivel de percolación por las zonas blancas t_c, puede ser introducido el nivel de percolación por las zonas negras t'_c. La demostración ulterior se divide en los siguientes puntos:

1. De la simetría de la función $V(X, Y)$ resulta que $t_c = -t'_c$. Efectivamente, sustituyamos V por $-V$ en cada punto del plano. Con ello se obtiene la función $V' = -V$ que posee, por término medio, las mismas propiedades, así que los niveles de percolación calculados con su ayuda deben ser los mismos que los calculados con ayuda de la función inicial. De la desigualdad $V < t_c$ resulta la desigualdad $-V > -t_c$, es decir, $V' > -t_c$. Cuando $t = t_c$, las zonas blancas ($V < t_c$) forman, desde el punto de vista de la función V, un racimo infinito. Esas mismas zonas del espacio serán negras si se examina la función V' y $t = -t_c$, ya que en ellas, $V' > -t_c$. Por consiguiente, para la función V', el valor de $t = -t_c$ también es el nivel de percolación por las zonas negras. Pero, como ya fue dicho, los niveles de percolación en las funciones V y V' deben ser iguales. Por lo tanto, para la función V, el nivel de percolación por las zonas negras también es $t'_c = -t_c$.

2. Si $t_c < 0$, entonces, a medida que aumente t, al principio aparecerá percolación por las zonas blancas (cuando $t = t_c < 0$), y después (cuando $t = -t_c > 0$) desaparecerá la percolación por las zonas negras. En la zona $t_c < t < -t_c$ existe percolación tanto por las zonas blancas como por las negras. Si $t_c > 0$, primero desaparecerá la percolación por las zonas negras, y luego, ésta aparecerá por las blancas. Además, en la zona $-t_c < t < t_c$ no habrá ningún tipo de percolación.

3. En el caso del problema plano, la percolación por las zonas negras excluye la percolación por las blancas y al revés. Efectivamente, si por un sistema montañoso se puede navegar en un buque del Oeste al Este, eso significa que por el mismo es imposible viajar del Norte al Sur por tierra firme. Por consiguiente, se excluye el caso $t_c < 0$. Por otra parte, la falta de percolación por las zonas blancas significa obligatoriamente su presencia por las zonas negras del Norte al Sur. (Para convencerse de ello es preciso estudiar los cuadros del tipo de la figura 40). Así pues, también se excluye el caso $t_c > 0$. Por lo tanto, queda una sola posibilidad: $t_c = 0$. Precisamente en esto consiste el resultado: *el nivel de percolación es igual a cero.*

Con ayuda de la fórmula (2) puede ser calculada la parte crítica del área x_c. De la condición de normalización de la función de distribución (véase la fórmula (1) en el capítulo 2) se deduce que, cuando $t_c = \infty$, el segundo miembro de la fórmula (2) es igual a la unidad. De la simetría de la función $f(y)$ resulta que, cuando $t_c = 0$, la parte del área $x_c = 0,5$.

En el caso tridimensional, la percolación por las zonas blancas del Oeste al Este no excluye la percolación por las zonas negras del Norte al Sur, ya que los canales de percolación pueden ser desenlazados con facilidad. (Recuerden los desenlaces que se hacen a distintos niveles de altura en las carreteras.) Por esta razón, en el caso tridimensional, $t_c < 0$ y, de acuerdo con la fórmula (2), $x_c < 0,5$. El cálculo realizado por el método de Montecarlo, según el esquema indicado anteriormente para las funciones aleatorias gaussianas, ha mostrado que en el caso tridimensional $x_c = 0,16 \pm 0,01$.

Para la estimación aproximada del valor x_c se puede utilizar el método, con ayuda del cual se apreciaron los umbrales de percolación del problema de los nudos en el capítulo 6. Este método consiste en que alrededor de cada nudo se construyen bolas (o círculos en el caso plano) de radio igual a la distancia hasta el nudo inmediato. La bola construida en torno al nudo blanco se considera blanca, y en torno al nudo negro, negra. Resultó que la percolación por las bolas blancas que rozan una con otra surge cuando la parte del espacio rellenado con ellas es aproximadamente igual para todos los retículos. Es natural suponer que esta parte debe ser próxima al valor de x_c que figura en el problema del nivel de percolación. Según las fórmulas (3) y (4) del capítulo 6, en el caso plano, la parte de la superficie ocupada por los círculos blancos es aproximadamente igual a 0,5, mientras que en el caso tridimensional, la parte del volumen ocupada por las bolas blancas es aproximadamente igual a 0,16. Así pues, ambas estimaciones coinciden exactamente con la solución del problema del nivel de percolación. Se puede esperar que $x_c = 0,16$ también proporcione una buena estimación de las funciones aleatorias no gaussianas.

COMPENSACIÓN DE LAS IMPUREZAS EN LOS SEMICONDUCTORES

El nivel de percolación desempeña un papel muy importante en la teoría de los semiconductores extrínsecos. Supongamos que en el semiconductor han sido introducidas, aproximadamente en igual cantidad, tanto impurezas de donador, como impurezas de

aceptor. Las primeras tienen un electrón sobrante en la capa periférica, y a las segundas, al revés, les falta un electrón. Por eso los donadores entregan fácilmente sus electrones a los aceptores y se convierten en donadores de carga positiva. Los aceptores aceptan esos electrones y se cargan negativamente. (Este fenómeno se denomina *compensación de impurezas.*) En vista de que las impurezas en los semiconductores se hallan dispuestas desordenadamente, surge un sistema caótico de cargas dispuestas positiva y negativamente. Cada carga genera en su alrededor un potencial eléctrico igual a $\pm e/\varepsilon r$, donde e es el valor absoluto de la carga del electrón; ε, la constante dieléctrica, y r, la distancia hasta la carga. El signo del potencial se determina por el signo de la carga.

El potencial de cualquier punto del espacio es la suma de los potenciales generados por todas las impurezas. Como estas últimas permanecen en el espacio de manera aleatoria, el potencial también es una función aleatoria.

Si el número de donadores es algo mayor que el número de aceptores, parte de los electrones quedarán en los donadores. Si la energía de enlace de los electrones con los donadores es relativamente pequeña, el movimiento térmico de los átomos separará con facilidad esos electrones. En principio, estos últimos pueden participar en el transporte de corriente eléctrica, pero dicho transporte está obstaculizado por el hecho de que en el espacio existe el potencial eléctrico generado por las impurezas cargadas. El potencial eléctrico multiplicado por la carga electrónica constituye la energía potencial de interacción del electrón con el campo eléctrico de impurezas. La energía potencial modifica en sumo grado el carácter de movimiento del electrón.

MOVIMIENTO DE UNA PARTÍCULA AL HABER ENERGÍA POTENCIAL

La energía total de la partícula E consta de la energía cinética igual a $mv^2/2$ (donde m es la masa de la partícula, y v, su velocidad) y de la energía potencial $V(\vec{r})$ que depende de las coordenadas del punto donde se encuentra esa partícula:

$$E = \frac{mv^2}{2} + V(\vec{r}). \qquad (3)$$

Aquí $\vec{r}$ es el vector trazado del origen de coordenadas hacia el punto donde se encuentra la partícula.

El movimiento de la partícula se describe mediante la función $\vec{r}(t)$, donde t es el tiempo. El principio fundamental de la mecánica consiste en que durante el movimiento, la energía total de la

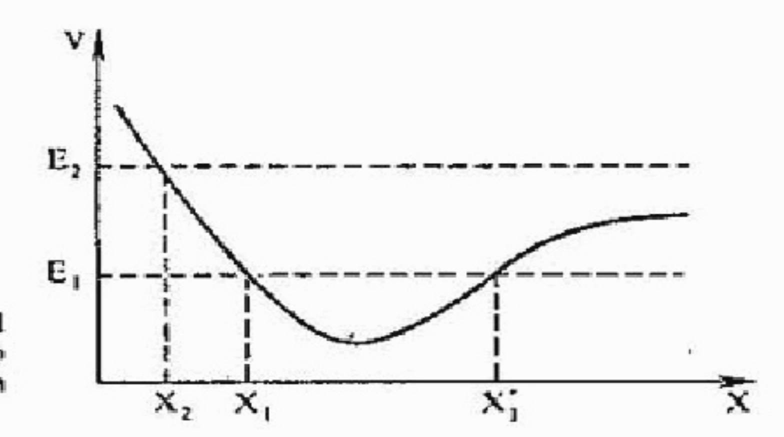


Fig. 41. Energía potencial del electrón V_e como función de la coordenada X (línea llena).

partícula E no cambia. Esto significa que al variar la coordenada, la velocidad de la partícula cambiará de tal modo que será compensado el cambio de la función $V(\vec{r})$. La ley de conservación de la energía, así como el hecho de que la energía cinética $mv^2/2$ debe ser una magnitud positiva, impone importantes limitaciones al movimiento de la partícula.

Para simplificar supongamos que V sólo depende de una coordenada (de X) y que la velocidad también está dirigida a lo largo del eje X. Admitamos que $V(X)$ tiene la forma representada en la figura 41. El carácter de movimiento de la perticula se determina conforme al valor de su energía total. Si ésta es igual a E_1, la energía cinética será positiva sólo en la zona $X_1 < X < X_1'$. Los puntos X_1 y X_1' determinan los límites de movimiento. La velocidad en estos puntos se reduce a cero y, por consiguiente, ellos se llaman *puntos de parada*. La partícula de energía E_1 será capturada *por el pozo de potencial* que se encuentra entre los puntos de parada, y la misma no podrá salir de la zona de ese pozo. La zona de su movimiento está limitada por dos lados. La partícula de energía E_2 no podrá penetrar más a la izquierda del punto X_2, en cambio la zona de su movimiento no será limitada por el lado derecho.

Así pues, según la relación entre la energía total y la energía potencial, el movimiento de la partícula puede ser limitado o ilimitado.

Cabe señalar que la mecánica cuántica admite la penetración de la partícula en una zona de energía cinética negativa. Pero si la función $V(\vec{r})$ es bastante suave (precisamente así sucede en el caso de los semiconductores con gran concentración de impurezas compensadas), esa penetración no desempeñará un papel importante.

MOVIMIENTO DEL ELECTRÓN EN EL CAMPO DE IMPUREZAS

La energía potencial del electrón, enlazada con los potenciales de las impurezas dispuestas caóticamente, es una función aleatoria de las coordenadas. Si la energía total E del electrón es pequeña, éste sólo podrá moverse en una zona limitada del espacio, rodeada por todas partes por puntos de parada. Al disponer de mucha energía, el electrón adquirirá la posibilidad de moverse por todo el espacio. Solamente en este caso el mismo podrá participar en el transporte de la corriente eléctrica.

Es preciso comprender la diferencia entre el problema monodimensional, examinado en el apartado anterior, y el problema bidimensional o tridimensional (volumétrico). Si la partícula sólo puede moverse a lo largo de cierta recta, para que su movimiento sea ilimitado en ambas direcciones, la energía de la partícula debe ser mayor que todos los valores que adquiere en esta recta la energía potencial. Por lo tanto, debe cumplirse la condición rígida $E > V_{\text{máx}}$, donde $V_{\text{máx}}$ es el valor máximo de la energía potencial.

En los casos bidimensional o tridimensional no es imprescindible dicha condición. La partícula puede *contornear* las zonas donde su movimiento está prohibido. Tan sólo es necesario que las zonas donde el movimiento está permitido, formen un sistema "de lagos y canales" por los cuales la partícula pueda marcharse a un sistema infinito y alejarse a una distancia infinita.

De aquí se deduce que ha surgido el problema de determinación del nivel de percolación. Supongamos que $V(\vec{r})$ es la función aleatoria que representa la energía potencial del electrón. Tras fijar la energía total E, llamaremos zonas blancas del espacio, aquellas en las que $E > V(\vec{r})$ (la energía cinética es positiva), y zonas negras, aquellas en las que $E < V(\vec{r})$. Hay que hallar el nivel de percolación, es decir, el valor crítico de E_c con el que surge percolación por las zonas blancas.

Sólo son libres y participan en el transporte de la corriente eléctrica (esta energía a veces se llama *umbral de movilidad*) los electrones cuya energía es superior a E_c. A bajas temperaturas la energía E_c es mucho mayor que la energía del movimiento térmico de los átomos kT. Por eso la probabilidad de que el electrón adquiera la energía E_c es pequeña. También es respectivamente pequeña la concentración de electrones capaces de transportar la corriente. Al aumentar la temperatura, dicha concentración crece bruscamente, debido a lo cual también crece la electroconductibilidad del sistema. Así pues, el umbral de percolación E_c determina

la dependencia térmica de la electroconductibilidad del semiconductor extrínseco compensado.

A temperaturas muy bajas los electrones se acumulan en los pozos de potencial más profundos y no participan en el transporte de la corriente. Por este motivo, a temperaturas bajas el semiconductor extrínseco compensado se convierte en un dieléctrico.

Como ya fue dicho en el capítulo 8, cuando es bastante grande la concentración de impurezas de un tipo (por ejemplo, de donadores), el semiconductor adquiere conductibilidad metálica, la cual depende muy poco de la temperatura incluso hasta el cero absoluto (transición de Mott). La compensación de impurezas (por ejemplo, la agregación de aceptores) conduce al incremento de la energía potencial caótica y a la interrupción de la conductibilidad metálica. Existe una teoría detallada de tal fenómeno, basada en las nociones acerca del nivel de percolación.

Tercera parte
COMPORTAMIENTO CRÍTICO DE DISTINTAS VARIABLES CERCA DEL UMBRAL DE PERCOLACIÓN Y GEOMETRÍA DEL RACIMO INFINITO

En esta parte se hablará de los aspectos de la teoría de percolación más interesantes desde el punto de vista de física, es decir, del comportamiento de distintas variables en las cercanías del umbral de percolación. En las partes anteriores fue dicho que tales variables físicas como la imantación espontánea de la sustancia ferromagnética con impurezas, o la electroconductibilidad de una rejilla con nudos bloqueados, se reducen a cero en el punto de umbral. En esta parte se examinarán las leyes que describen su comportamiento cerca del umbral. Para deducir tales leyes es necesario entender las propiedades del racimo infinito.

Capitulo 11 **
RED DE BETHE

En el capítulo 5 fue mostrado que los umbrales de percolación de algunos problemas planos pueden ser determinados con exactitud. Pero en ningún lugar se dijo que también es posible hallar la función $P(x)$, es decir, la probabilidad de que cierto nudo pertenezca al racimo infinito. En la actualidad las expresiones exactas de esta función (así como de la electroconductibilidad de la rejilla) son desconocidas tanto para los problemas planos como para los tridimensionales. Una exclusión es la llamada red de Bethe, la cual, como será mostrado más adelante, debe ser clasificada como una red en el espacio, con un número infinito de dimensiones. Más abajo se expone el planteamiento y la solución del problema de los nudos en la red de Bethe.

RUMORES

"¡Qué pajarotadas corrían por la ciudad! ¿Por qué diantre no podía uno asomar las narices, sin verse abrumado de historias abracadabrantes? Sin embargo, cuando tales rumores corrían, no

sería sin razón. ¡Sin razón! ¿Qué razón puede haber en lo de almas muertas? Ninguna. ¡Todo ello no eran más que pataratas, paparruchas, cuentos de camino!..."—se indignaba Nicolás Vasílievich Gógol, describiendo cómo el chismorreo absurdo difundido por dos damas destruyó la aventura muy prometedora de Chíchikov. "Las dos amigas ..., cada una por su parte, se fueron a revolucionar la ciudad. La empresa les resultó a maravilla. Al cabo de hora y media los espíritus fermentaban, sin comprender nada del asunto. Su nebulosa relación admiró a todo el mundo, comenzando por los funcionarios ... Quedáronse con la boca abierta, dilatados los ojos de carnero"[1].

En efecto, los rumores se propagan con fantástica velocidad. Pero eso deja de ser asombroso si analizamos el siguiente modelo matemático.

Ese modelo está representado en la figura 42, *a*. Supongamos que cierta "dama encantadora a todas luces", designada por el círculo A, comunicó las novedades a tres de sus conocidos B_1, B_2 y B_3. Cada uno de ellos las transmitió a tres conocidos suyos más, de manera que "de segundas manos" han recibido la información nueve personas designadas por los círculos C. Cada una de estas nueve personas también transmitió la información a tres conocidos suyos, a consecuencia de lo cual con ésta se familiarizaron 27 personas más. Es fácil calcular que "de las décimas manos" recibirán los datos ¡$3^{10} = 59\,049$ personas! Si suponemos que para transmitir la información a tres conocidos suyos, cada persona gasta 20 min, obtendremos que todo el asunto ocupará 200 min = 3 h 20 min.

Por supuesto que ese modelo simplifica mucho el proceso que transcurre en las Se considera que el número de conocidos de toda la gente es el mismo. Además, se supone que cada persona obtiene la información sólo de una persona. Esto significa que en cada círculo (fig. 42, *a*) entra una sola línea. Gracias a tal propiedad, el modelo recuerda un árbol que se ramifica infinitamente por todos los lados. Cada uno de los círculos pude considerarse como la base de su árbol, con la particularidad de que los árboles que nacen, por ejemplo, de los círculos B_1, B_2 y B_3, no tienen entre sí ningún círculo común. Lo mismo se puede decir de los árboles cuyas bases son los círculos C, etc.

En la literatura científica este modelo se llama así mismo, o sea, *árbol*. Pero también es conocido con el nombre de *red de Bethe*, en

[1] Nicolás V. Gogol, Las almas muertas, (Aventuras de Chichikov), Poema. Editorial Cervantes, Barcelona, 1926, págs. 206–207.—(*Nota del traductor.*)

honor al famoso físico Hans A. Bethe. Los círculos mostrados en la figura 42, *a* son los nudos de esta red. El número de líneas salientes de los nudos de la red de Bethe puede ser arbitrario (pero idéntico para todos los nudos). Designemos ese número por q. En la figura 42, *a* se ofrece la red con $q = 3$.

Ahora recordemos que la mayoría de la gente tiene un punto de vista propio y no participa en la propagación de rumores. Dividamos a toda la gente en dos categorías: en la categoría *Cl*, mostrada en la figura mediante círculos claros, incluiremos a la gente que transmite la información recibida a sus conocidos (fig. 42, *b*). De estos círculos pueden salir q flechas. Incluyamos en la categoría *Os*, mostrada mediante círculos oscuros, a la gente que no participa en la propagación de los rumores. De los círculos oscuros (fig. 42, *b*) no sale ni una sola flecha.

La presencia de círculos oscuros se refleja mucho en la propagación acelerada de los rumores. Examinemos la confi-

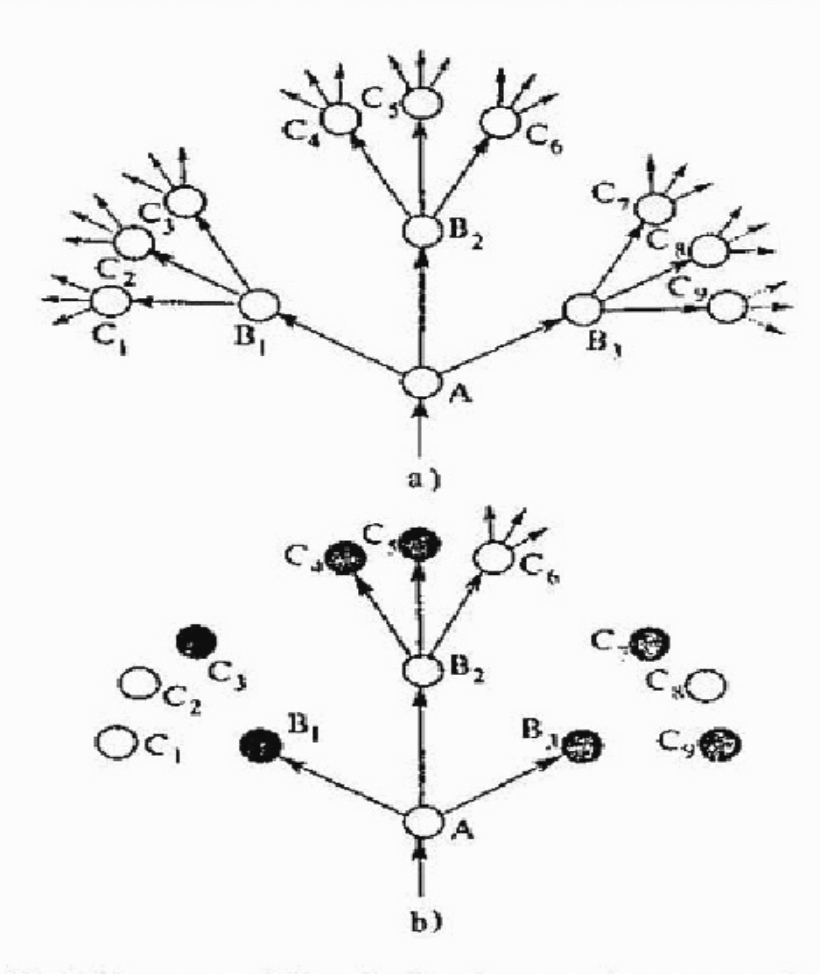


Fig. 42. Red de Bethe con $q = 3$. Los círculos claros son las personas de categoría *Cl*, y los oscuros, las de categoría *Os*.

guración ofrecida en la figura 42,*b*. De los tres círculos B_1, B_2 y B_3 sólo uno resultó claro y transmitió el rumor más adelante. Los círculos C_1, C_2 y C_3 con mucho gusto chismorrearían, pero B_1 y B_3 no les transmitieron nada. De C_4, C_5 y C_6 a los círculos *Cl* pertenece sólo C_6. Por lo tanto, de segundas manos, en lugar de 9 personas, los rumores alcanzaron solamente a tres personas, con la particularidad de que a las manos siguientes los transmitirá sólo C_6.

Supongamos que el sistema sujeto a examen no está limitado y tiene una cantidad infinita de círculos. Entonces puede ser planteada la siguiente pregunta. ¿Morirá, después de un número finito de transmisiones, el rumor procedente del punto A, o el mismo alcanzará una distancia infinita a partir de A, y en el sistema infinito se pondrá al alcance de un número infinito de personas? Como se deduce de la figura 42,*b*, eso depende de la cantidad relativa de círculos claros y oscuros y de las configuraciones que aparecen en los alrededores del nudo.

En realidad se trata del problema de los nudos de la teoría de percolación, pero enunciado con arreglo a la red de Bethe. Supongamos que la cantidad de gente perteneciente a la categoría *Cl* es igual a x. Esto significa que la persona elegida al azar, con una probabilidad igual a x, resultará perteneciente a la categoría *Cl*, y con una probabilidad igual a $1 - x$, a la categoría *Os*. El problema que debemos resolver consiste en lo siguiente. ¿Cuál es la probabilidad $P(x)$ de que los rumores transmitidos a una persona elegida al azar se ponguen al alcance de un número infinito de personas? Claro está que con pequeños valores de x, esta probabilidad es igual a cero, pero, no obstante, la misma comenzará a diferenciarse del cero a partir de cierto valor crítico de $x = x_c$.

SOLUCIÓN DEL PROBLEMA DE LOS NUDOS EN LA RED DE BETHE

En lugar de la función $P(x)$ conviene introducir la probabilidad de que los rumores transmitidos a una persona elegida al azar no se pondrán al alcance de un número infinito de personas. Designemos esta probabilidad por $Q(x)$. Es evidente que

$$Q(x) = 1 - P(x), \tag{1}$$

ya que los acontecimientos examinados forman un sistema completo de acontecimientos.

Para $Q(x)$ puede ser compuesta una ecuación algebraica. Debemos razonar del modo siguiente. La transmisión de los

rumores puede interrumpirse por dos causas incompatibles. La primera consiste en que la persona elegida al azar pertenezca a la categoría *Os*. La segunda causa consiste en que aunque la persona pertenezca a la categoría *Cl* y transmita los rumores q a la gente, todos los canales procedentes de esa gente se interrumpirán en distintas etapas. Por lo tanto, la probabilidad Q es la suma de las probabilidades de dos acontecimientos incompatibles. La probabilidad de que la persona elegida al azar resulte en la categoría *Os* es igual a $1 - x$. Si designamos por W' la probabilidad de que esa persona pertenezca a la categoría *Cl*, pero que la transmisión de los rumores se interrumpa en etapas más lejanas, entonces

$$Q = 1 - x + W'.$$

Ahora pasemos a la probabilidad W'. El resultado que ella describe es la consecuencia de la realización simultánea de dos acontecimientos: 1) la persona elegida al azar resulta en *Cl* (la probabilidad de tal acontecimiento es igual a x), 2) todos los q canales que parten de los conocidos de la persona elegida al azar, se interrumpen en cualquier etapa. Es evidente que esos dos acontecimientos son independientes. Por esta razón, la probabilidad W' es igual al producto de las probabilidades: $W' = xW(x)$, así que

$$Q = 1 - x + xW(x), \tag{2}$$

donde $W(x)$ es la probabilidad de que todos los q canales se interrumpan en cualquier etapa (por supuesto que esta etapa puede ser diferente en distintos canales).

Examinemos uno de los q canales que empiezan en uno de los conocidos de la persona elegida al azar. El acontecimiento que consiste en que este canal se interrumpa por doquier, equivale a que los rumores transmitidos a dicho conocido se pongan al alcance de un número infinito de personas. Según la definición, la probabilidad de dichos acontecimiento es igual a $Q(x)$.

Para el análisis sucesivo resulta muy importante que los árboles cuyas bases son los q conocidos de la persona elegida al azar, no tengan círculos comunes. De aquí se deduce que si un árbol tiene una configuración determinada de círculos claros y oscuros, eso no se reflejará en la probabilidad de cualquier configuración de círculos en otros árboles. (Es evidente que si hubiera círculos comunes, la última afirmación sería injusta.) Por eso los acontecimientos que consisten en que los rumores se interrumpan en uno y en otros canales son independientes.

Así pues, la probabilidad de que todos los q canales se

interrumpan es igual al producto de las probabilidades de que se interrumpa cada uno de los q canales por separado:

$$W(x) = [Q(x)]^q. \quad (3)$$

Después de sustituir la fórmula (3) en la (2) obtenemos la ecuación para $Q(x)$:

$$Q(x) = 1 - x + x[Q(x)]^q. \quad (4)$$

Notemos que la circunstancia decisiva que permitió reducir el problema a la ecuación algebraica (4) ha sido la independencia de los diversos canales. Esta propiedad es típica exclusivamente de la red de Bethe, y por eso el método antes utilizado, con arreglo a las redes ordinarias no conduce al éxito, aunque a menudo se usa para obtener un resultado correcto aproximado.

Pasemos al análisis de la ecuación (4). Ésta tiene sentido para cualquier valor de x en el intervalo $0 \leqslant x \leqslant 1$. Escribámosla a través de $P(x) = 1 - Q(x)$. Obtenemos

$$[1 - P(x)]^q x + P(x) - x = 0. \quad (5)$$

Una de las soluciones de la ecuación (5) es $P(x) = 0$ para cualquier valor de x, sin embargo, la ecuación (5), cuando $q > 1$, no es lineal y tiene otras soluciones. En particular, cuando $x = 1$, la solución también es $P(1) = 1$, con la particularidad de que en este caso tiene sentido físico precisamente la segunda solución, ya que si todos los círculos son claros, la probabilidad P debe ser igual a la unidad y no a cero.

La ecuación (5) puede resolverse fácilmente cuando $q = 2$. En este caso existen dos soluciones: $P(x) = 0$ y $P(x) = 2 - 1/x$. Cuando $x > 1/2$ tiene sentido físico la segunda solución. Cuando $x < 1/2$, el resultado es negativo y no tiene sentido.

Así pues, cuando $q = 2$ tiene sentido la siguiente solución:

$$P(x) = \begin{cases} 0 \text{ cuando } 0 \leqslant x < {}^1/_2, \\ 2 - 1/x \text{ cuando } {}^1/_2 < x \leqslant 1. \end{cases}$$

El umbral de percolación x_c en este caso es igual a ${}^1/_2$.

Una solución análoga existe con todos $q > 1$, sin embargo, el umbral de percolación x_c depende de q. En un caso general es posible hallar x_c y el aspecto de $P(x)$ cuando x es próximo a x_c, suponiendo de antemano que $P(x) \ll 1$, lo cual siempre es justo en el entorno del umbral de percolación. El término $(1 - P)^q$ en la ecuación (5) puede ser descompuesto según la fórmula del binomio

$$(1 - P)^q = 1 - qP + \frac{q(q-1)}{2} P^2 - \dots \quad (7)$$

Como $P \ll 1$, cada término posterior será mucho menor que el anterior. Por eso sustituimos la fórmula (7) en la ecuación (5) considerando que en el segundo miembro de la fórmula (7) hay sólo tres términos escritos. Obtenemos

$$\frac{q(q-1)}{2} xP^2 = qPx - P$$

Suponiendo $P \neq 0$ dividimos ambos miembros de esta igualdad por P y hallamos

$$P = \frac{(x - 1/q)2}{x(q-1)}. \tag{8}$$

Cuando $q = 2$, la fórmula (8) coincide con (6). Esta solución se reduce a cero cuando $x = 1/q$. De aquí resulta que $x_c = 1/q$. La solución (8) tiene sentido cuando $q > 1$, $x > 1/q$ y solamente para valores de x muy próximos a $1/q$. Por eso en el denominador de la expresión (8) se puede poner $x = 1/q$. Definitivamente obtenemos

$$P(x) = \frac{(x - 1q)2q}{q-1}. \tag{9}$$

La expresión (9) describe la función $P(x)$ cerca del umbral de percolación.

EXAMEN DE LOS RESULTADOS

Cuando $q = 1$, la función $P(x) = 0$ para todos los valores de x en el intervalo $0 \leqslant x < 1$, y en ese intervalo la ecuación (5) no tiene ninguna otra solución. Cuando $q = 1$ y $x = 1$, la ecuación (5) se satisface con cualquier valor de P.

Cuando $q = 1$, la red de Bethe se convierte en una cadena lineal de nudos. En tal cadena, una cantidad muy pequeña de nudos negros interrumpe la percolación por los nudos blancos. Por eso es natural que para todos los valores de x en el intervalo $0 \leqslant x < 1$, la propagación de los rumores se interrumpa inevitablemente, es decir, $P(x) = 0$. El valor de x_c para una cadena lineal ess igual a la unidad.

Como fue mostrado en el apartado anterior, en un caso general, $x_c = 1/q$. Este resultado podría ser previsto con antelación. En el problema examinado, cada persona transmite los rumores q a sus conocidos. El número medio de gente de categoría *Cl* entre esos conocidos es igual a qx. Por consiguiente, después de cada transmisión, en lugar de una fuente de información surgen, por término medio, qx fuentes. Por lo tanto, la variable qx es el *coeficiente de reproducción*. Para que no termine el proceso, es

necesario que el coeficiente de reproducción sea mayor que la unidad. De aquí se deduce que la concentración crítica x_c se obtiene de la condición $qx_c = 1$, es decir, $x_c = 1/q$.

Recordemos que de modo análogo se determina la condición necesaria para mantener la reacción en cadena de fisión del uranio. El proceso de propagación de rumores, en realidad, también es una reacción en cadena y se describe por el mismo esquema que la explosión nuclear.

Es interesante comparar el valor obtenido de x_c con los resultados de los problemas reticulares en los espacios de gran número de dimensiones. El cálculo aproximado del umbral de percolación del problema de los nudos se efectuaba para los llamados *hiperretículos* (o *hiperredes*). Son retículos del mismo tipo que el cuadrado y el cubo sencillo, pero en un espacio de gran número de dimensiones. El número de coordinación z (número de nudos inmediatos) para tales retículos se determina mediante la fórmula $z = 2d$, donde d es la dimensión del espacio (cuando $d = 2$ obtenemos $z = 4$, y cuando $d = 3$ obtenemos $z = 6$). Los cálculos del umbral de percolación se realizaban cuando $d = 4, 5, 6$. Fue demostrado que los resultados se describen bien por la fórmula

$$x_y = \left(1 + \frac{6,3}{d^2}\right)\frac{1}{z-1}. \tag{10}$$

Con valores de d bastante grandes puede ser despreciado el segundo término entre paréntesis, y $x_y = 1/(z-1)$. Pero para la red de Bethe, $z - 1 = q$. Pues en cada nudo de esta red entra un enlace, y q enlaces salen de él.

De aquí se deduce que el umbral de percolación en la red de Bethe ($x_c = 1/q$) es igual que en la hiperred de gran número de dimensiones. Por lo tanto, la red de Bethe corresponde como a un espacio de dimensiones infinitas.

La red de Bethe es el único sistema para el cual se ha conseguido hallar con precisión el aspecto de $P(x)$ cerca del umbral de percolación. Resultó (véase la fórmula (9)) que en este caso $P(x)$ se reduce a cero cuando $x \to x_c$ según *la ley lineal* $P \sim (x - x_c)$. Como será visto más adelante, lo expuesto es una propiedad específica de la red de Bethe, así como de todas las redes en un espacio de gran número de dimensiones.

EJERCICIO

1. Examinen el problema de los enlaces en la red de Bethe. Consideren que todos los nudos son idénticos y que hay enlaces íntegros y enlaces rotos. Supongan que la porción de enlaces

íntegros es igual a x. Hallen la función $P(x)$ determinada del mismo modo que antes.

Capítulo 12
ESTRUCTURA DEL RACIMO INFINITO

MODELO DE SHKLOVSKI–DE GENNES

Examinemos, para mayor certeza, el problema de los nudos y supongamos que la concentración de nudos no bloqueados es un poco mayor que la concentración de umbral, por lo cual existe un racimo infinito. Este último es una especie de cadenas infinitas de nudos enlazados entre sí. Al unirse todos los nudos enlazados del racimo infinito, mediante segmentos de rectas, se obtienen conjuntos de líneas quebradas que se cruzan una con otra (véase la fig. 15, donde se muestra una de tales líneas).

Llámase estructura del racimo infinito su geometría en escalas mucho más grandes que el período de la red. En tales escalas, las roturas que tienen lugar en los nudos de la red no se perciben a simple vista y la cadena se representa como una línea suavemente corvada.

La figura 43 ilustra un pequeño fragmento de un racimo infinito. En los extremos A y B ese racimo no finaliza: el mismo se desvía a la izquierda y a la derecha a una distancia infinita. Introduzcamos ahora la siguiente clasificación de los puntos y líneas del racimo infinito. Los sectores del racimo infinito se dividen en el *esqueleto* y *los extremos muertos*.

Se considera que un punto pertenece al esqueleto del racimo infinito si, por lo menos, dos vías que salen de él a distintos lados, permiten alejarse a una distancia infinita. Tal punto es, por ejemplo, C en la figura 43. De éste es posible alejarse a una distancia infinita tanto hacia el lado derecho como hacia el izquierdo. Si a la distancia infinita sólo conduce una vía que sale de dicho punto, éste pertenecerá al extremo muerto. Por ejemplo, del punto D en la figura 43 es posible alejarse a una distancia infinita moviéndose sólo hacia arriba. El movimiento hacia abajo conduce a la vía muerta. Por eso se estima que el punto D se encuentra en el extremo muerto.

Rechacemos mentalmente todos los extremos muertos y tratemos de imaginarnos qué estructura tiene el esqueleto del racimo infinito. El modelo elemental del esqueleto fue propuesto por el físico soviético B. I. Shklovski y por el físico francés P. De Gennes, independientemente uno de otro. Para el problema plano

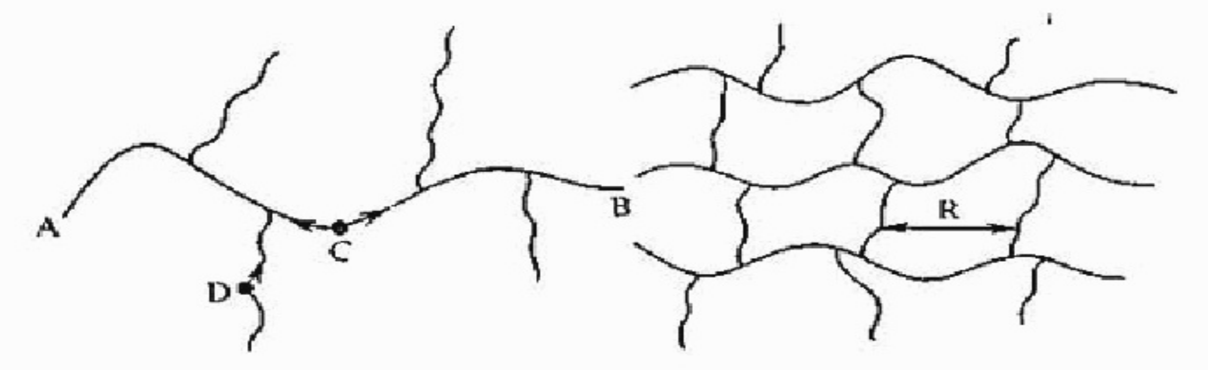


Fig. 43. Fragmento de un racimo infinito con los extremos muertos.

Fig. 44. Esqueleto de un racimo infinito.

este modelo es una especie de red pesquera muy grande, vieja y muy desgastada. La misma ya ha perdido su periodicidad rigurosa, sus cuerdas están flojas, algunos nudos están rotos y otros se han desplazado de sus lugares, pero, no obstante, "por término medio" es una red (fig. 44).

La dimensión lineal característica de la malla (célula) de esa red R se llama *radio de correlación* del racimo infinito. Dicho radio crece bruscamente al acercarse al umbral de percolación:

$$R = \frac{l}{|x - x_c|^{\nu}}. \qquad (1)$$

Aquí l es la longitud que, según el orden de magnitud, equivale al período del retículo, y ν es un número positivo que se denomina *índice del radio de correlación*. Por lo tanto, con el acercamiento al umbral de percolación, la red se hace cada vez más rala.

La existencia de un radio de correlación que se reduce al infinito es una propiedad general de todos los fenómenos críticos. El hecho de que ese radio se reduzca al infinito precisamente con arreglo a la ley exponencial (1), no se ha demostrado con rigor, pero constituye la base de las ideas actuales acerca de los fenómenos críticos y, por lo visto, ello ha sido bien confirmado por los datos experimentales.

El radio de correlación también tiene sentido cuando $x < x_c$, es decir, más abajo del umbral. En dicha zona ese radio describe *la dimensión máxima de los racimos finitos*. Si $x \to x_c$ del lado de los valores menores ($x < x_c$), el radio de correlación también se reducirá al infinito según la ley (1). Eso significa que los racimos finitos, al acercarse al umbral de percolación por abajo, aumentan ilimitadamente sus dimensiones y, cuando $x = x_c$, se juntan en un

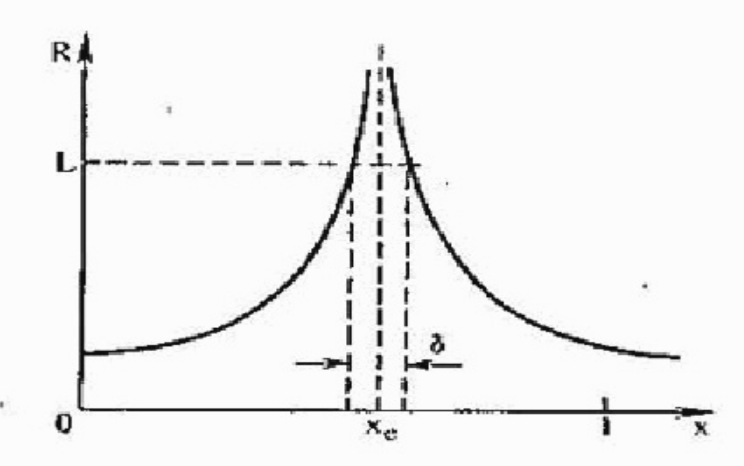


Fig. 45. Variación del radio de correlación en función de x. Se muestra la anchura de la región crítica δ para el cuadrado $L \times L$ (véase el siguiente apartado).

racimo infinito. Por consiguiente, la dependencia $R(x)$ tiene el aspecto mostrado esquemáticamente en la figura 45.

En el caso de los problemas volumétricos (tridimensionales), el modelo de Shklovski–De Gennes tiene un aspecto análogo. El mismo se parece a la armadura de alambre estropeada de una red tridimensional, con la particularidad de que la longitud de una malla se expresa mediante la fórmula (1). Sólo se debe tener en cuenta que los valores numéricos de los índices del radio de correlación, para los problemas planos y tridimensionales, son diferentes.

Examinemos ahora a qué corolarios conduce la noción de la estructura reticular del racimo infinito.

IMPORTANCIA DE LAS DIMENSIONES DEL SISTEMA

En los capítulos 1, 2 y 3 fue subrayado que la noción de umbral de percolación sólo tiene sentido en un sistema infinito. En tal sistema el umbral de percolación varía de una muestra a otra, o sea, es una variable aleatoria. Pero los valores que adquiere esta variable corresponden, con máxima probabilidad, a cierta zona de anchura $\delta(\mathcal{N})$, denominada *zona crítica*. Al aumentar el número de nudos en el sistema $\mathcal{N}$, la anchura de tal zona disminuye con arreglo a la ley exponencial (véase la fórmula (8) en el capítulo 1), por lo cual, cuando $\mathcal{N} \sim \infty$, el umbral de percolación adquiere sentido evidente, y de variable aleatoria se convierte en una magnitud cierta.

En los capítulos iniciales del libro, esos datos fueron comunicados prácticamente sin sacar ninguna conclusión. El concepto de

radio de correlación permite comprenderlos y obtener la fórmula (8) del capítulo 1.

Para entender mejor la cuestión, analicemos el experimento de una rejilla pantalla de dimensiones $L \times L$, cuyo esquema se ofrece en la figura 1. Supongamos que se hicieron muchos experimentos en los que se utilizaron diversas sucesiones aleatorias de nudos bloqueados, cuyo resultado fue la obtención de un conjunto de umbrales de percolación. Recordemos que las configuraciones de los nudos bloqueados, obtenidos en distintos experimentos, no se parecen nada entre sí.

Un buen modo de razonar consiste en lo siguiente. Imaginémonos una rejilla pantalla *infinita*, con una porción establecida x de nudos no bloqueados. Supongamos que en distintos sectores de tal rejilla se aplica un cuadrado de dimensiones $L \times L$ y se estudia la percolación del lado izquierdo al lado derecho de ese cuadrado, por los nudos no bloqueados que se encuentran dentro del mismo (fig. 46). Aplicando el cuadrado en distintos sectores de la rejilla infinita, es posible examinar los resultados de varios experimentos en una rejilla finita.

En una rejilla pantalla infinita, la percolación surge exactamente cuando $x = x_c$, pero, como veremos ahora, eso no significa, ni mucho menos, que cuando $x > x_c$ siempre hay percolación en el cuadrado $L \times L$.

Cuando $x > x_c$, en el sistema infinito existe un racimo infinito. Representemos su esqueleto en forma de la red pesquera mostrada en la figura 44. Para los razonamientos ulteriores es muy importante la relación entre el radio de correlación y la longitud del cuadrado L. Al principio supongamos que L supera considerablemente R. Entonces (fig. 46) dentro del cuadrado se encontrarán muchas mallas de la red del racimo infinito que

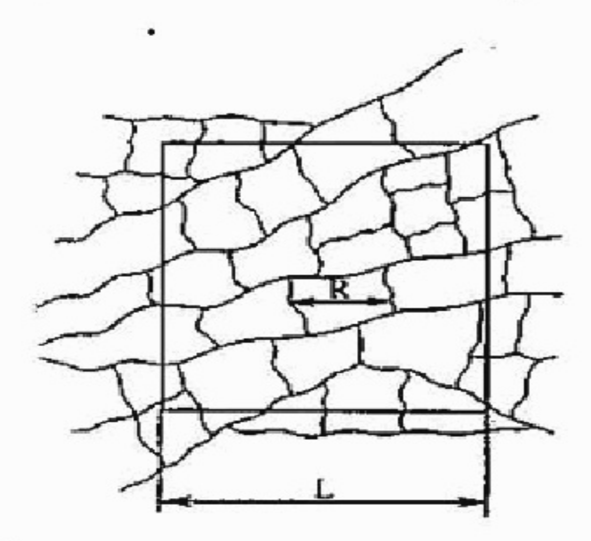


Fig. 46. Cuadrado superpuesto sobre una red infinita para $R \ll L$ y $x > x_c$.

asegura la percolación entre los lados del cuadrado. Tales mallas pueden ser de tamaños diferentes, y la red del racimo infinito puede tener grandes huecos, pero si en el cuadrado debe haber, por término medio, muchas mallas, la probabilidad de que en el racimo haya un hueco cuya dimensión constituya un cuadrado entero, es infinitamente pequeña. Por eso se saca la siguiente conclusión:

Si $x > x_c$, el umbral de percolación del cuadrado no puede encontrarse en la zona de valores de x que satisfagan la fuerte desigualdad $L \gg R(x)$. Dicha zona debe permanecer más arriba del umbral.

De acuerdo con la fórmula (1), cuando x tiende a x_c, el radio de correlación crece ilimitadamente y, con cierto valor de x, se iguala con L inevitablemente. Ahora no se puede decir nada determinado de la percolación dentro del cuadrado. Todo depende de la configuración concreta de los nudos bloqueados dentro de él.

Ahora supongamos que $x < x_c$ y que el radio de correlación es mucho menor que L. Cuando $x < x_c$, el radio de correlación constituye la longitud máxima de los racimos finitos. Si $R \ll L$, no existirá un racimo tal que pueda enlazar los lados del cuadrado. Por eso sacamos otra conclusión determinada:

Si $x < x_c$, el umbral de percolación del cuadrado tampoco puede encontrarse en la zona de valores de x que satisfagan la fuerte desigualdad $L \gg R(x)$. Dicha zona debe permanecer más abajo del umbral.

Si $x < x_c$, pero el valor de x es muy próximo a x_c, el radio de correlación será mayor que L. En este caso no se puede decir nada determinado de la percolación en el cuadrado. En un sistema infinito existen racimos infinitos de tamaño mayor que L, pero dentro de ellos hay huecos de ese mismo tamaño, y todo depende de la configuración concreta de los nudos bloqueados dentro del cuadrado.

Ahora se puede estimar el tamaño de la zona crítica en la que pueden encontrarse los valores del umbral de percolación del cuadrado $L \times L$. Según las conclusiones (I) y (II), esta zona debe determinarse según la condición $L \lesssim R$. Como se deduce de la

figura 45, cuanto mayor sea L tanto más estrecha será esa zona y tanto más fuertemente ella permanecerá apretada contra el umbral de percolación en un sistema infinito. La anchura de la zona δ se determina con arreglo a la condición $R(\delta) = L$. Utilizando la fórmula (1) obtenemos $l/\delta^{\nu} = L$, o bien

$$\delta = \left(\frac{l}{L}\right)^{1/\nu}. \qquad (2)$$

Dentro de la zona crítica, es decir, cuando $|x - x_c| \ll \delta$, los umbrales de percolación de los cuadrados de longitud L están distribuidos de modo homogéneo (véase la fig. 5, donde se muestra la función de distribución de los umbrales de percolación). El punto $x = x_c$ dentro de tal zona no se distingue en nada. En efecto, es un punto en el que surge percolación en un sistema infinito. Pero es imposible determinar si hay o no hay tal percolación, operando con un cuadrado de dimensión finita. Si $L < R$, aplicando el cuadrado en distintos sectores de la rejilla infinita, no se puede decir si en ésta sólo existen racimos finitos o si éstos ya se han juntado y forman un racimo infinito. *El estudio de la percolación en un cuadrado de tamaño finito sólo permite determinar la anchura de la zona crítica.*

En este apartado solamente se examinaron los problemas planos. Sin embargo, todo lo dicho puede ser aplicado a los problemas volumétricos. La anchura de la zona crítica para estos últimos también se determina mediante la fórmula (2). Surge una pequeña diferencia al expresar la anchura δ por el número integro de nudos $\mathcal{N}$ y no por el tamaño del sistema L. La cuestión reside en que $\mathcal{N} = (L/a)^d$, donde a es el período del retículo, y d, la dimensión del espacio. Por eso, de acuerdo con la fórmula (2),

$$\delta(\mathcal{N}) = \frac{C}{\mathcal{N}^{1/\nu d}},$$

donde C es un coeficiente numérico que no puede ser determinado con arreglo a esos razonamientos tan sencillos. En el caso plano ($d = 2$), la fórmula (3) coincide con la fórmula (8) del capítulo 1. Precisamente con ayuda de dicha fórmula, a consecuencia de la investigación de la función $\delta(\mathcal{N})$ hallada por medio del ordenador, por primera vez fue determinado el índice del radio de correlación del problema plano. Resultó que $\nu_2 = 1{,}33$. (Aquí y más adelante, el número 2 indica que se trata del índice de un sistema bidimensional.) Para los problemas tridimensionales, el índice ν es distinto: $\nu_3 = 0{,}8\ldots0{,}9$. (El número 3 significa que el índice pertenece a los problemas tridimensionales.)

Para tener una idea más clara de la materia sometida a estudio, examinemos las rejillas bi o tridimensionales con nudos bloqueados. Como fue dicho en los capítulos iniciales del libro, la electroconductibilidad de tales rejillas difiere de cero cuando $x > x_c$, y se reduce a cero en el umbral de percolación x_c. Los datos experimentales, así como los obtenidos mediante los cálculos realizados en un ordenador, indican que la electroconductibilidad específica de las rejillas se reduce a cero con arreglo a la siguiente ley:

$$\sigma(x) = \sigma_0 (x - x_c)^t, \tag{4}$$

donde el factor σ_0, según el orden de magnitud, equivale a la electroconductibilidad específica de una rejilla sin nudos bloqueados. La variable t se denomina *índice crítico de electroconductibilidad* y es objeto de un estudio muy minucioso, principalmente mediante cálculos en el ordenador. (En uno de los últimos cálculos, por ejemplo, se usaba una rejilla cuadrada que tenía 800 × 800 nudos.) Fue establecido que para las rejillas bidimensionales $t_2 = 1{,}3$, mientras que para las tridimensionales $t_3 = 1{,}6 \ldots 1{,}7$.

El modelo de rejilla del racimo infinito permite deducir la fórmula (4) y enlazar el índice t con el índice del radio de correlación. La corriente eléctrica sólo fluye por el racimo infinito y precisamente por su esqueleto. En los extremos muertos, fijados en el esqueleto sólo por un lado, no hay corriente. Si hacemos que la corriente eléctrica sea bastante intensa, de manera que brille el alambre por el que ella fluye, el esqueleto del racimo infinito podrá ser observado a simple vista en la oscuridad: los canales iluminados en un fondo oscuro. A lo lejos del umbral toda la rejilla brilla más o menos uniformemente, mientras que cerca del umbral, la distancia entre los canales iluminados aumenta y, por último, en el propio umbral la iluminación desaparece por completo, es decir, la corriente en el sistema se interrumpe.

Calculemos la electroconductibilidad específica del esqueleto del racimo infinito. Se debe tener en cuenta que tal cálculo no puede pretender al registro correcto de los factores numéricos. El mismo sólo permite obtener la dependencia entre σ y $x - x_c$. Esa dependencia no varía al sustituir mentalmente la red incorrecta e irregular por una rejilla ideal de período R.

Al principio examinemos el caso plano (véase la fig. 46). La resistividad es igual a la resistencia de un cuadrado de longitud unitaria. El número de alambres que atraviesan tal cuadrado es

igual a $1/R$, donde R es la distancia entre los alambres, la cual se expresa mediante la fórmula (1). Designemos por ρ_0 la resistencia de un alambre de longitud unitaria. Todos los alambres están conectados en paralelo. Por consiguiente, la resistividad

$$\rho = \frac{\rho_0}{(1/R)} = \rho_0 R,$$

mientras que la electroconductibilidad específica

$$\sigma = \rho^{-1} = \rho_0^{-1} R^{-1}. \quad (5)$$

Sustituyendo la fórmula (1) obtenemos

$$\sigma = \sigma_2 (x - x_c)^{\nu}, \quad (6)$$

donde $\sigma_2 = \rho_0^{-1} l^{-1}$.

En el caso tridimensional es necesario calcular la resistividad de una armadura de alambres que representa, por ejemplo, una red cúbica sencilla de período R (del tipo de red sólo depende el coeficiente numérico). La resistividad es igual a la resistencia de un cubo con una longitud unitaria de sus aristas. El número de alambres conectados en paralelo y que atraviesan la cara de tal cubo es igual a $1/R^2$. Por esta razón, la resistividad

$$\rho = \frac{\rho_0}{(1/R^2)} = \rho_0 R^2, \quad (7)$$

mientras que la electroconductibilidad específica es igual a

$$\sigma = \rho_0^{-1} R^{-2} = \sigma_3 (x - x_c)^{2\nu}, \quad (8)$$

donde $\sigma_3 = \rho_0^{-1} l^{-2}$.

Para evitar errores debemos prestar atención a que la electroconductibilidad específica σ en los casos bi y tridimensional tiene distinta dimensión. En el caso bidimensional ésta se mide en Ω^{-1}, y en el caso tridimensional, en $\Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$.

Los factores σ_2 y σ_3, según el orden de magnitud, son las electroconductibilidades específicas de las rejillas bi y tridimensionales sin nudos bloqueados. En efecto, como se deduce de las fórmulas (5 y (8), la electroconductibilidad específica $\sigma(x)$ se convierte en σ_2, o bien en σ_3, cuando $R = l$, es decir, cuando la red del racimo infinito coincide con la rejilla inicial en la que se plantea el problema. Por lo tanto, la variable σ_0 en la fórmula (4) y en el caso bidimensional constituye σ_2, y en el caso tridimensional, σ_3.

Al comparar las fórmulas (5) y (6) con la fórmula (4), obtenemos que en el caso bidimensional $t = \nu$, mientras que en el tridimensional $t = 2\nu$. Utilizando $\nu_2 = 1,3$ y $\nu_3 = 0,8 \ldots 0,9$

obtenemos $t_2 = 1{,}3$ y $t_3 = 1{,}6 \ldots 1{,}8$, cuyos resultados son muy semejantes a los datos expuestos más arriba. Tal coincidencia atestigua a favor del modelo de Shklovski–De Gennes.

1. Este modelo del esqueleto del racimo infinito puede ser generalizado del modo siguiente. Imaginémonos que los alambres que forman el esqueleto son muy sinuosos (fig. 47). La distancia entre los puntos de su intersección, como antes, es igual a $R(x)$ y se expresa mediante la fórmula (1). Sin embargo, si se endereza el pedazo de alambre situado entre dos puntos de intersección, su longitud superará considerablemente R. Representemos tal longitud $\mathscr{L}$ de la forma siguiente:

$$\mathscr{L} = \frac{l}{(x - x_c)^{\zeta}} (x > x_c),$$

donde $\zeta > \nu$. Cuando $x \to x_c$, la relación $\mathscr{L}/R = (x - x_c)^{-(\zeta - \nu)}$ tiende al infinito.

La longitud $\mathscr{L}$ sólo tiene sentido a condición de que $\mathscr{L} \gg R$, es decir, de que $\zeta > \nu$. Pero existe la demostración de que $\zeta = 1$. Por eso la generalización planteada del modelo de Shklovski–De Gennes (en realidad esta generalización fue hecha por los propios autores del modelo) sólo es razonable cuando $\nu < 1$. En el caso bidimensional $\nu = 1{,}3$, por eso no puede haber ningún tipo de "sinuosidad". Pero en el caso tridimensional $\nu < 1$, y hay motivos para pensar que la "sinuosidad" del esqueleto del racimo infinito existe en realidad.

Expresen el índice crítico de electroconductibilidad t, por los índices ζ y ν en en el caso tridimensional y utilizando el modelo generalizado.

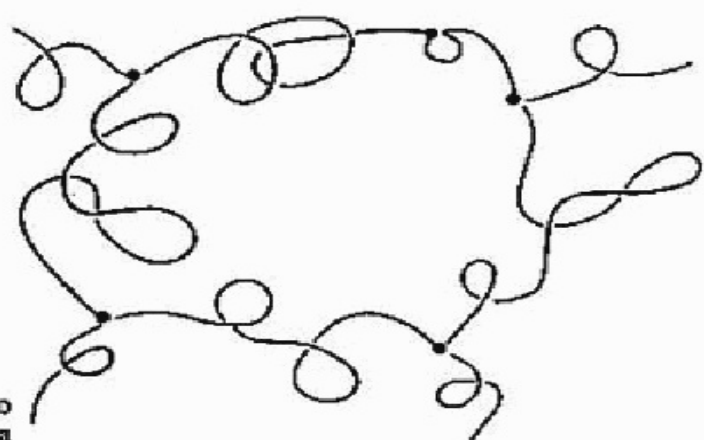


Fig. 47. Esqueleto de un racimo infinito teniendo en cuenta la "sinuosidad".

FUNCIÓN $P(x)$ CERCA DEL UMBRAL DE PERCOLACIÓN. IMPORTANCIA DE LOS EXTREMOS MUERTOS

Al igual que la electroconductibilidad, la función $P(x)$, que es la porción de nudos pertenecientes al racimo infinito, se reduce a cero cuando $x = x_c$. Las investigaciones han mostrado que cerca del umbral esta función tiene el siguiente aspecto:

$$P(x) = D(x - x_c)^{\beta}, \qquad (3)$$

donde D es el coeficiente numérico del orden de la unidad, y β, otro índice crítico. Se ha establecido que para los problemas bidimensionales $\beta_2 = 0{,}14$, y para los tridimensionales $\beta_3 = 0{,}4$. Estos resultados fueron obtenidos principalmente con ayuda del ordenador.

A la función $P(x)$ contribuyen todos los nudos del racimo infinito, así como los que pertenecen al esqueleto y a los extremos muertos. Con ayuda del modelo del racimo infinito es posible determinar cuáles son los nudos más abundantes. Al principio supongamos que no hay en absoluto extremos muertos, y calculemos la contribución a $P(x)$ por parte del esqueleto del racimo infinito.

En el caso bidimensional, a cada célula del racimo infinito le corresponden aproximadamente R/a nudos pertenecientes al esqueleto, donde a es el período del retículo (al igual que en el apartado anterior, aquí se hace una estimación que no pretende establecer los coeficientes numéricos). El área de la célula es del orden de R^2 y, por consiguiente, el número completo de nudos en ella es del orden de R^2/a^2. De aquí resulta que la porción de nudos pertenecientes al esqueleto del racimo infinito constituye

$$P_{esq}(x) \sim \frac{a}{R} \sim (x - x_c)^{\nu}. \qquad (10)$$

Aquí $\sim$ significa la igualdad según el orden de magnitud (sin tener en cuenta los coeficientes numéricos del orden de la unidad).

En el caso tridimensional, a cada célula del racimo infinito también le corresponden (R/a) nudos pertenecientes al esqueleto, pero la cantidad total de nudos en la célula es del orden de $(R/a)^3$. Por esta razón, en el caso tridimensional

$$P_{esq}(x) \sim \left(\frac{a}{R}\right)^2 \sim (x - x_c)^2. \qquad (11)$$

Comparando las fórmulas (10) y (11) con las (6) y (8), obtenemos que la porción de nudos pertenecientes al esqueleto del

racimo infinito, según el orden de magnitud, coincide con la función $\sigma(x)/\sigma_0 = (x - x_c)^t$.

Comparando las fórmulas (10) y (11) con la fórmula (9) vemos que

$$\frac{P_{esq}(x)}{P(x)} \sim (x - x_0)^{\nu_2 - \beta_2}$$

en el caso bidimensional, en tanto que en el tridimensional

$$\frac{P_{esq}(x)}{P(x)} \sim (x - x_c)^{2\nu_3 - \beta_3}.$$

Recordemos que $\nu_2 = 1{,}3$ y $\nu_3 \approx 0{,}9$. Por consiguiente, $\nu_2 - \beta_2 = 1{,}2$ y $2\nu_3 - \beta_3 \approx 1{,}4$. Así que, tanto en el caso bidimensional como en el tridimensional, la relación $P_{esq}(x)/P(x)$ tiende rápidamente a cero cuando $x \to x_c$. Eso significa que los nudos que forman el esqueleto del racimo infinito constituyen una proporción insignificante del número total de nudos pertenecientes al racimo infinito. *La "masa" fundamental del racimo infinito está concentrada en los extremos muertos* y es inútil en absoluto, desde el punto de vista de la electroconductibilidad. Por esta razón, en las cercanías del umbral de percolación $\sigma(x)/\sigma_0 \ll P(x)$ (véase la fig. 10). Sin embargo, los extremos muertos son precisamente los que determinan la imantación espontánea de la sustancia ferromagnética con impurezas en las cercanías del umbral de percolación (véase el capítulo 3).

UNIVERSALIDAD DE LOS ÍNDICES CRÍTICOS

Nos hemos familiarizado con tres índices críticos: ν, t y β que describen el comportamiento de distintas variables en las cercanías del umbral de percolación. Este comportamiento también se llama crítico, ya que las funciones $R(x)$, $\sigma(x)$ y $P(x)$ tienen, cuando $x = x_c$, *puntos singulares*. Por ejemplo, la función $R(x)$ se reduce al infinito, y en la función $P(x)$ la primera derivada en el punto x_c tiene discontinuidad. Por el lado izquierdo la misma es igual a cero, y por el derecho se reduce al infinito. En la función $\sigma(x)$ tiene discontinuidad la segunda derivada. En la teoría de percolación son conocidas muchas otras variables que tienen comportamiento crítico y, correspondientemente, muchos otros índices críticos.

Para cada uno de los índices críticos antes examinados se daban dos valores: para los problemas bi y tridimensionales. Pero existe un gran conjunto de problemas bi y tridimensionales. Por ejemplo, existen los problemas tridimensionales de los nudos, de

los enlaces, de las esferas, el problema de determinación del nivel de percolación en un potencial aleatorio y muchos otros. ¿De qué índices, pues, se trataba? Ahora nos acercamos, quizás, al momento más interesante en la teoría de percolación. De acuerdo con las ideas actuales, *los índices críticos para todos los problemas en el espacio de una misma dimensión son idénticos.* (Entre los problemas mencionados en este libro constituye una exclusión únicamente el problema de la percolación orientada.) La afirmación acerca de la universalidad de los índices críticos es más bien adoptada que demostrada con rigor. Sin embargo, las numerosas verificaciones de dicha afirmación, ejecutadas con ayuda del ordenador, no pudieron refutarla.

¿En qué consisten los motivos físicos de la universalidad de los índices? Por lo visto, en que ellos son determinados por la estructura de los racimos en las cercanías del umbral de percolación. En este caso el papel principal lo desempeñan las propiedades geométricas de los racimos, que se manifiestan a grandes distancias (del orden del radio de correlación). En las cercanías del punto de umbral, tales distancias superan en mucho el período del retículo (en el caso de los problemas reticulares) o el radio de la esfera (en el caso del problema de las esferas). Por eso la geometría de los racimos no depende del retículo en que se plantea el problema. Este último puede ser, en general, no reticular, sino planteado en los nudos dispuestos arbitrariamente en el espacio, y eso tampoco se reflejará en la estructura de los grandes racimos. Pero, por supuesto, la dimensión del espacio se refleja considerablemente en la geometría de los racimos, ya que, por ejemplo, es mucho más fácil asegurar el "desenlace" de las líneas en el espacio tridimensional, que en el bidimensional. Por estas causas los índices críticos no dependen del tipo de problema, sino de la dimensión del espacio.

Es interesante indicar que el cambio de los índices críticos al aumentar la dimensión del espacio, ocurre hasta la dimensión 6. A partir del espacio de seis dimensiones, los índices no cambian al aumentar la dimensión, además, el índice $\beta = 1$, como en la red de Bethe. Cuando $d \geqslant 6$, el problema de los índices críticos se simplifica considerablemente y admite una solución exacta.

Así pues, a distinción de los umbrales de percolación que dependen esencialmente del tipo de problema, los índices críticos poseen cierta universalidad. De aquí se deduce lo siguiente. Si los resultados del experimento físico se interpretan con ayuda de la teoría de percolación, y la estructura microscópica del sistema sujeto a examen no ha sido del todo aclarada, antes que nada es preciso comparar los índices críticos con la teoría de percolación.

ya que éstos no dependen casi de ningún factor. Precisamente así se hace al analizar los datos experimentales de la electroconductibilidad en los materiales heterogéneos (véase el capítulo 9).

La teoría de percolación adoptó la idea de universalidad de los índices críticos, de la teoría de las transiciones fásicas de segundo género (a las transiciones fásicas de segundo género, que ocurren al subir la temperatura, pertenecen, por ejemplo, la transición del metal del estado de superconductor al estado normal y la transición del material ferromagnético al estado no ferromagnético). En las cercanías del punto de transición fásica de segundo género, al igual que cerca del umbral de percolación, se forman zonas de gran tamaño que se distinguen entre sí por sus propiedades. La diferencia consiste en que los límites de esas zonas no "están congelados", como en la teoría de percolación, sino que cambian en función del tiempo gracias al movimiento térmico. El tamaño de las referidas zonas también se llama radio de correlación y se expresa por la fórmula (1).

De la teoría de transiciones fásicas también surgió otra idea importante: *la hipótesis de la semejanza*. Con arreglo a la teoría de percolación, esta hipótesis consiste en lo siguiente. Supongamos que han sido tomadas fotografías de distintos sectores de una rejilla de nudos bloqueados, con dos valores de x iguales a x_1 y x_2. Ambos valores se encuentran por un lado de x_c y son próximos a x_c. Supongamos, por ejemplo, que $x_1 - x_c > x_2 - x_c > 0$. Cuando $x = x_1$, el radio de correlación $R_1 = l(x_1 - x_c)^{-\nu}$. Según la condición, $R_1 < R_2$. La semejanza consiste en que si las fotografías tomadas cuando $x = x_1$ se amplían con relación a R_2/R_1, "por término medio" ellas no se distinguirán de las fotografías tomadas cuando $x = x_2$. Además, se supone que esas fotografías son tan "pequeñas" que en ellas no se ven los nudos y los enlaces, sino que sólo los grandes bloques. Por lo tanto, la hipótesis consiste en que al acercarse al umbral de percolación, la geometría de gran escala del sistema se transforma de modo semejante, con la particularidad de que todas las dimensiones lineales aumentan proporcionalmente al radio de correlación.

Cabe señalar que el modelo de Shklovski – De Gennes satisface la hipótesis de la semejanza, pero ésta es mucho más amplia. La misma se refiere no sólo al esqueleto del racimo infinito y, en general, no supone la división en esqueleto y en extremos muertos.

La enunciación matemática de la hipótesis de la semejanza permite establecer relación entre los índices críticos ν, β y el tercer índice que aquí no fue introducido. Los cálculos muestran que dicha relación se cumple bien.

Las ideas de semejanza, introducidas por primera vez por los físicos soviéticos A. Z. Patashinski y V. L. Pokrovski, así como por el físico norteamericano L. Kadanoff, constituyen la base de la actual teoría de las transiciones fásicas y de la teoría de percolación.

Con las ideas de semejanza se hallan relacionados otros nuevos métodos matemáticos de cálculo de los índices críticos. Estos métodos se han desarrollado considerablemente en la última década y alcanzaron cierta perfección. Hoy día casi todos los índices fundamentales han sido calculados con la ayuda de dichos métodos. Pero los cálculos son tan complicados que es muy difícil exponerlos en este libro.

Capítulo 13
ELECTROCONDUCTIBILIDAD A SALTOS

En los capítulos anteriores fue detalladamente descrito cómo se emplea la teoría de percolación para calcular la electroconductibilidad de los sistemas que constan de elementos dispuestos aleatoriamente. Además, cada elemento era conductor o no conductor, pero las resistencias de todos los elementos conductores se estimaban idénticas. A tal tipo de sistemas pertenecen las rejillas con enlaces rotos o con nudos bloqueados, la mezcla de bolas metálicas y dieléctricas, etc.

Ahora hablaremos de otra clase de sistemas que también están aleatoriamente formados por elementos diferentes, pero cuyas resistencias pueden adoptar cualesquier valores situados en un intervalo muy amplio: desde los más mínimos hasta los más colosales. Resultó que el problema de cálculo de la resistencia de los sistemas que constan de gran número de tales elementos también puede ser solucionado por medio de la teoría de percolación. En 1971 fue construida la teoría de electroconductibilidad a saltos de los semiconductores, basada en las ideas de percolación. En este capítulo examinaremos el fenómeno de electroconductibilidad a saltos y daremos su descripción matemática.

DATOS EXPERIMENTALES

La figura 48 ilustra la dependencia entre el logaritmo de resistividad y la temperatura inversa $(1/T)$ para distintas muestras de germanio del tipo *p*. La resistividad se mide en $\Omega \cdot$cm, y la

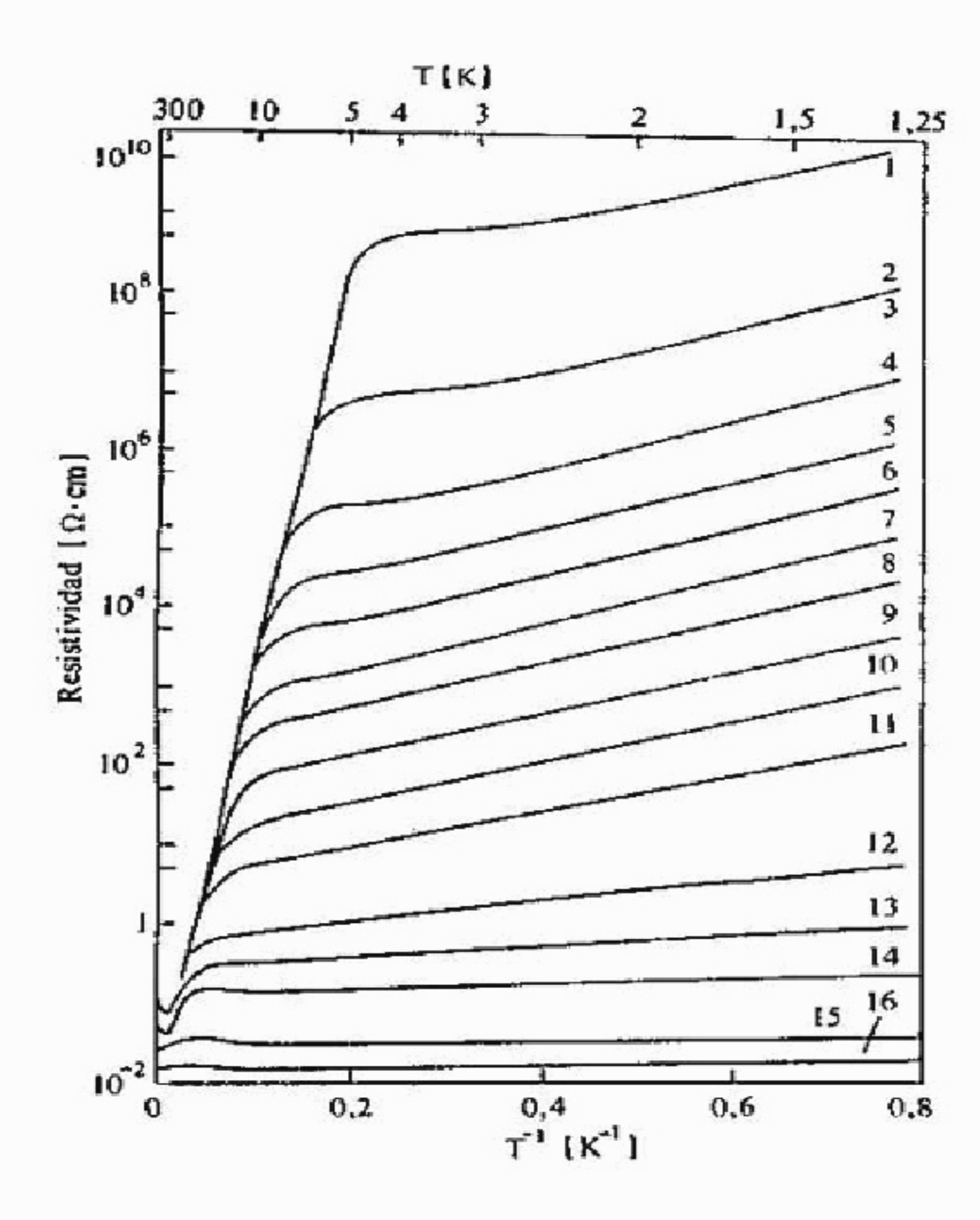


Fig. 48. Dependencia entre el logaritmo de resistividad del germanio compensado de tipo *p* y la temperatura inversa. Las rayas indican la continuación del sector de baja temperatura hasta la intersección con el eje de ordenadas. El punto donde la recta de trazos cruza el eje de ordenadas, proporciona los valores de ρ_0 (*N*) para una muestra dada. Las concentraciones de aceptores en las muestras son las siguientes (en cm^{-3}):
1 – 7,5 10^{14}; 2 – 1,4 10^{15}; 3 – 1,5 10^{15}; 4 – 2,7 10^{15}; 5 – 3,6 10^{15}; 6 – 4,9 10^{15}; 7 – 7,2 10^{15}; 8 – 9 10^{15}; 9 – 1,4 10^{16}; 10 – 2,4 10^{16}; 11 – 3,5 10^{16}; 12 – 7,3 10^{16}; 13 – 1,0 10^{17}; 14 – 1,5 10^{17}; 15 – 5,3 10^{17}; 16 – 1,35 10^{18}. Según los datos de Fritzsche y de Cuevas.

temperatura inversa, en grados inversos de Kelvin. En la escala horizontal superior, para facilitar la exposición, la temperatura inversa ha sido transformada en "simplemente temperatura". En la figura hay en total 16 curvas correspondientes a las muestras de diversa concentración de aceptores. Como fue dicho en el capitulo 8, con concentraciones bastante altas de impurezas, en los semiconductores ocurre la transición de Mott. Con concentraciones superiores a las críticas, surge electroconductibilidad de tipo metálico, la cual depende muy poco de la temperatura. La figura 48 ilustra esa transición, además, la concentración crítica N_c resulta del orden de 10^{17} cm^{-3}. Las muestras 15 y 16 tienen electroconductibilidad de tipo metálico, la (14) se encuentra "en el límite", y las demás muestras se diferencian por una brusca y destacada dependencia entre la temperatura y la resistencia, típica de los semiconductores.

La dependencia de temperatura de las muestras 1 ... 11 tiene dos sectores diferentes. En términos generales, para cada muestra, el gráfico consta de dos rectas que se cruzan. Una de ellas, correspondiente a temperaturas más altas, tiene una inclinación abrupta, mientras que la inclinación de la segunda es más suave. (¡Recordemos que la parte derecha del eje de abscisas corresponde a temperaturas más bajas!) En cada uno de esos sectores la resistencia puede ser representada en la forma siguiente:

$$\rho = \rho_0 e^{\varepsilon/kT}, \tag{1}$$

donde ρ es la resistividad; ρ_0, un factor que no depende de la temperatura; e, la base del logaritmo natural; k, la constante de Boltzmann; T, la temperatura en grados Kelvin. La energía ε se denomina energía de activación. Como se deduce de la fórmula (1),

$$\ln \rho = \ln \rho_0 + \frac{\varepsilon}{kT} \ln e, \tag{2}$$

es decir, la dependencia entre $\ln \rho$ y T^{-1} efectivamente se muestra mediante una recta, con la particularidad de que el ángulo de inclinación es proporcional a la energía de activación ε. Cada una de las curvas 1 ... 11 se caracteriza por dos energías de activación: la energía grande y la energía pequeña.

El origen de la energía de activación grande es relativamente simple: equivale al trabajo que hay que gastar para separar el hueco del aceptador, o sea, es igual a la energía de enlace del hueco. La probabilidad de que este último adquiera tal energía a expensas de las vibraciones térmicas, como se deduce de la física molecular, es proporcional a $e^{-\varepsilon/kT}$. Por eso el número de huecos libres también es proporcional a dicho factor. De aquí se obtiene

que la electroconductancia σ también es proporcional a $e^{-\varepsilon/kT}$, mientras que la resistividad $\rho = \sigma^{-1}$ es proporcional a $(e^{-\varepsilon/kT})^{-1} = e^{\varepsilon/kT}$. Es natural que esta energía de activación no depende de la concentración de aceptores. En efecto, el ángulo de la pendiente de alta temperatura de todas las curvas en la figura 48 es aproximadamente idéntico. Sin embargo, al bajar la temperatura, cada curva experimenta una flexión. A bajas temperaturas las curvas, como antes, se describen mediante la ecuación (1), pero la variable ρ_0 ahora depende mucho de la concentración de aceptores. Para subrayar esa circunstancia designemos por $\rho_0(N)$ la variable ρ_0 del sector de bajas temperaturas. La energía de activación en dicho sector es mucho menor que la energía de enlace del hueco en el aceptor, y depende de N. Designemos la energía de activación por $\varepsilon(N)$. La electroconductibilidad en el sector de baja temperatura se llama *electroconductibilidad a saltos*.

MECANISMO DE LA ELECTROCONDUCTIBILIDAD A SALTOS

En el proceso de estudio de la teoría de electroconductibilidad a saltos hablaremos del semiconductor del tipo n, en el cual los portadores de corriente son electrones y no huecos. Tal estudio resulta más evidente, aunque no existe ninguna diferencia importante entre los semiconductores del tipo n y del tipo p, así que todo lo dicho también concierne al experimento con el germanio del tipo p, analizado en el apartado anterior.

Así pues, examinemos un semiconductor extrínseco que contiene impurezas donadoras. Consideraremos que la concentración de impurezas es pequeña en comparación con la concentración crítica N_c con la que ocurre la transición de Mott: metal–dieléctrico (véase el capítulo 8). En tales condiciones es pequeño el recubrimiento de las capas electrónicas de los átomos extrínsecos inmediatos. Por eso cada donador puede ser considerado como un átomo hidrogenoide aislado, cuyo electrón exterior se halla alejado del átomo a una distancia del orden de a_B^* y tiene una energía de enlace del orden de E_B^* (capítulo 8). Supongamos que la temperatura es tan baja, que la energía térmica de los átomos oscilantes es insuficiente para que los electrones se separen de los donadores. ¿Cómo se realizará en este caso la electroconductibilidad?

Imaginémonos que parte de los donadores no tienen electrón exterior. Eso suele suceder a consecuencia de la compensación de las impurezas (capítulo 10). Si el semiconductor contiene no sólo

impurezas donadoras, sino también aceptoras, cada aceptor capturará un electrón del donador. Si hay menos aceptores que donadores, parte de los donadores conservarán su electrón exterior y otra parte quedará sin electrón y tendrá carga positiva.

El mecanismo de electroconductibilidad a saltos consiste en que el electrón "salta" de un donador a otro que hasta el momento no tenía electrón.

Ahora examinemos el caso cuando la energía potencial del electrón donador exterior depende muy poco de la posición del donador en el espacio, es decir, de la configuración de las impurezas cargadas que rodean dicho donador. Este caso corresponde a una concentración pequeña de impurezas. En condiciones típicas de conductibilidad a saltos, la dispersión de las energías de los electrones exteriores situados en distintos donadores, constituye alrededor de $^1/_{10}$ de la energía de enlace E_B^*.

En tal situación el obstáculo fundamental para el "salto" electrónico entre los donadores es la atracción del electrón hacia el donador a que él pertenece en el estado inicial. Razonando desde el punto de vista de la mecánica clásica, para que el electrón de la órbita de un donador pase a la órbita de otro donador es necesario realizar cierto trabajo en contra de las fuerzas de atracción, ya que el electrón debe ser alejado a la mitad de la distancia entre los donadores (véase la fig. 49). Después de eso el electrón comenzará a ser atraido por el segundo donador. Si la disposición de los donadores es rala, dicho trabajo se diferenciará muy poco del trabajo necesario para alejar al infinito el electrón perteneciente al donador aislado, es decir, se diferenciará muy poco de la energía de enlace E_B^*.

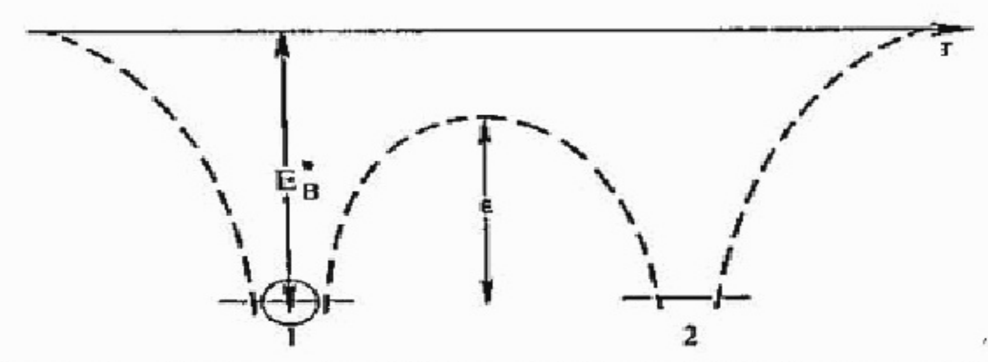


Fig. 49. La curva de trazos representa la energía potencial del electrón como función de la coordenada *r* al haber dos donadores cargados en los puntos *1* y *2*. Los trazos horizontales son los niveles de la energía de los electrones en los donadores. El círculo es el electrón que se encuentra en el donador *1*; E_B^*, la energía de enlace del electrón; ε, el trabajo que debe ser realizado para trasladar el electrón al donador *2*. La saeta horizontal representa la unión a efecto de túnel.

¿En qué consiste, pues, la ventaja de la electroconductibilidad a saltos ante la electroconductibilidad de los electrones libres? El hecho es que la electroconductibilidad a saltos es un fenómeno cuántico. La mecánica cuántica permite al electrón pasar de un donador a otro evitando el estado libre y sin apropiarse de la energía del movimiento térmico de los átomos. Tal transición se denomina unión a efecto de túnel (fig. 49). La ley de conservación de la energía también sigue en vigor para las uniones a efecto de túnel. Dicha ley requiere que la energía de los electrones en estados inicial y final sea idéntica. Por eso, si gracias a los potenciales de las impurezas circundantes, las energías del electrón en el primero y en el segundo donadores son diferentes, será necesario, a pesar de todo, tomar la energía insuficiente y entregar la sobrante. Pero esa energía es 10 veces menor que E_B^*. Precisamente con ello se explica el hecho de que la energía de activación a baja temperatura, mostrada en la figura 48, es mucho menor que a alta temperatura. Por consiguiente, a bajas temperaturas la electroconductibilidad a saltos aventaja a la electroconductibilidad de electrones libres, ya que la misma requiere menores gastos energéticos. Pasemos ahora al estudio del factor $\rho_0(N)$ que no depende de la temperatura, pero que sí depende de la concentración de impurezas. El mismo puede ser obtenido de la figura 49, alargando mentalmente la recta de baja temperatura hasta su intersección con el eje de ordenadas (véase la línea de trazos en la fig. 49). La variable $\rho_0(N)$ es determinada por el punto de intersección. Para distintas curvas, las resistencias en los puntos de intersección se distinguen bruscamente una de otra, lo cual precisamente caracteriza la dependencia $\rho_0(N)$.

REJILLA DE RESISTENCIAS

La principal causa por la cual la variable $\rho_0(N)$ es grande y depende considerablemente de N, consiste en que la unión cuántica a efecto de túnel es un acontecimiento muy poco probable. Como fue dicho en el capítulo 8, la probabilidad de hallar el electrón exterior del donador a la distancia r del núcleo donador disminuye a partir de r según la ley e^{-2r/a_B^*}, donde $e \simeq$ $\simeq 2,72$ *es la base del logaritmo natural.* Si los donadores 1 y 2 se encuentran separados uno de otro a la distancia r_{12}, la probabilidad de hallar el electrón exterior del donador 1 en las cercanías del núcleo del donador 2 constituye e^{-2r_{12}/a_B^*}. Precisamente esta

variable contiene la probabilidad de unión a efecto de túnel. Como se deduce del capítulo 8, si la concentración de donadores es mucho menor que la concentración N_c correspondiente a la transición dieléctrico–metal, la distancia media entre los donadores será mucho mayor que a_B^* y, por regla general, la variable $e^{-2r_{12}/a_B^*} = 1/e^{2r_{12}/a_B^*}$ será muy pequeña.

No obstante, entre los donadores vecinos ocurren de vez en cuando uniones a efecto de túnel. Si al semiconductor se le aplica un campo eléctrico, resultará que las transiciones en dirección contraria al campo (en dirección de la fuerza activa) ocurren más a menudo que las transiciones en éste. Como consecuencia, surge una corriente eléctrica proporcional al campo eléctrico. Precisamente en esto consiste el fenómeno que nos interesa.

Para calcular la resistividad del semiconductor se utiliza un modelo llamado "rejilla de resistencias". Dicho modelo se enuncia no en el lenguaje de los átomos y las uniones a efecto de túnel, sino en el lenguaje de las resistencias electrotécnicas ordinarias. Imaginémonos que entre cada par de donadores ha sido intercalada una resistencia (fig. 50). Los propios donadores pueden ser representados en forma de bolas metálicas diminutas, a las cuales están soldados alambres de muchas resistencias. El segundo extremo de cada una de esas resistencias permanece soldado a otra bola. Como resultado, se obtiene una especie de rejilla tridimensional desordenada de resistencias. Por supuesto que si Uds. realmente quisieran armarla, sería necesario aumentar mucho las escalas del sistema. Efectivamente, la distancia media entre los donadores es del orden de 10^{-5} cm.

Las resistencias intercaladas entre los donadores deben ser calculadas a partir de la corriente de unión a efecto de túnel, que fluye entre esos donadores en un campo eléctrico dado. Ello se reduce a la solución de un problema cuántico mecánico que aquí

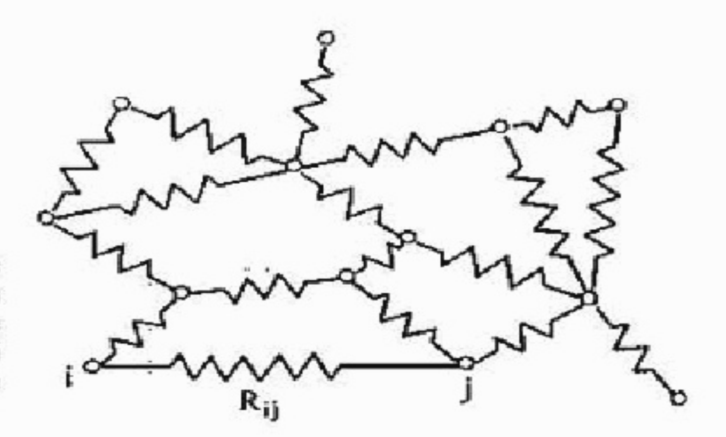


Fig. 50. Retículo arbitrario de resistencias. Los círculos representan los donadores que están enlazados entre sí imaginariamente mediante resistencias.

no expondremos. Notemos sólo que, de acuerdo con lo dicho más arriba, cuanto más lejos estén los donadores uno de otro, tanto menos corriente será transportada por las uniones a efecto de túnel situadas entre dichos donadores en un mismo campo.

Conforme a lo dicho, la resistencia $\mathscr{R}$ que enlaza los donadores situados a la distancia r uno de otro, puede ser representada de la forma siguiente:

$$\mathscr{R} = \mathscr{R}_0 e^{2r/a_B^*}, \qquad (3)$$

donde la variable $\mathscr{R}_0$ es idéntica para todas las resistencias (puede ser del orden de 1Ω). El problema consiste en hallar la resistividad de un sistema integrado por un número muy grande (10^{16} ... 10^{19}) de donadores aleatoriamente dispersados en el espacio.

PROPIEDADES DE LA REJILLA DE RESISTENCIAS

El principal rasgo del modelo sujeto a examen consiste en que las resistencias determinadas por la fórmula (3) se distinguen una de otra considerablemente. La distancia media entre los donadores r_D está enlazada con la concentración de donadores N_D mediante la relación $4/3\pi r_D^3 N_D = 1$ que significa que en una esfera de radio r_D hay, por término medio, un donador. En las condiciones en que suele observarse la electroconductibilidad a saltos, la variable r_D supera a_B^* 6 ... 12 veces.

Supongamos, por ejemplo, que $r_D = 10 a_B^*$. Entonces la resistencia intercalada entre los donadores situados a la distancia de $1{,}5 r_D$ se relacionará con la resistencia intercalada entre los donadores situados a la distancia de r_D, como $e^{r_D/a_B^*} = e^{10} = 2{,}2 \cdot 10^4$.

Los donadores con distancias recíprocas de r_D se encuentran tan a menudo como los donadores con distancias de $1{,}5 r_D$. Por lo tanto, el cambio insignificante de la distancia entre los donadores conduce a un cambio considerable de la resistencia intercalada entre éstos.

En principio, el modelo de la rejilla supone que la resistencia ha sido intercalada entre cada par de donadores. Pero las resistencias intercaladas entre los donadores alejados son tan grandes que pueden ser despreciadas sin duda alguna. Por regla general, esos mismos donadores están enlazados mediante una cadena de resistencias que pasa por los donadores que son inmediatos uno respecto a otro. Aunque la longitud de dicha cadena es mayor que la distancia más corta entre los donadores alejados, la resistencia de tal cadena es mucho menor que una resistencia intercalada entre los referidos donadores. Tales ya son las propiedades del

exponente: si $x_1 \gg 1$ y $x_2 \gg 1$, entonces $e^{x_1+x_2} = e^{x_1} \cdot e^{x_2} \gg e^{x_1} + e^{x_2}$. Por consiguiente, de hecho, en la rejilla sujeta a examen es suficiente dejar las resistencias que enlazan cada donador con sus 4 ... 5 donadores inmediatos.

DE NUEVO EL PROBLEMA DE LAS ESFERAS

Pasemos ahora al cálculo de la resistencia. Se supone el siguiente método de razonamientos. Desconectemos (desoldemos) todas las resistencias situadas entre las bolas que representan los donadores, y luego conectémoslas en determinado orden.

Conectemos al principio las resistencias que enlazan los donadores cuyas distancias de separación entre ellos son menores que cierta longitud r'. Eso significa que se han conectado las resistencias más pequeñas, cuyos valores óhmicos son inferiores a $\mathcal{R}' = \mathcal{R}_0 e^{2r'/a_B}$. Si la longitud r' es mucho menor que la distancia media entre los donadores r_D, entonces será necesario conectar resistencias sólo entre los donadores bastante separados, irregularmente próximos uno a otro. Por lo general, estas resistencias no se hallan enlazadas entre sí y no pueden asegurar la percolación de la corriente eléctrica por el sistema.

Aumentemos poco a poco la longitud r' conectando cada vez nuevas porciones de resistencias. A partir de cierto valor de $r' = r_c$ las resistencias conectadas formarán un racimo infinito. Cuando $r' > r_c$ el sistema comenzará a conducir la corriente eléctrica y poseerá una resistividad finita.

El problema de determinación de r_c es, de hecho, el problema de las esferas (capítulo 7). En efecto, construyamos en torno a cada donador una esfera de radio r'. Entonces las resistencias serán conectadas sólo entre los donadores, uno de los cuales permanece dentro de la esfera construida cerca del segundo. De acuerdo con los resultados del capítulo 7, tales donadores formarán por primera vez un racimo infinito, a condición de que

$$B_c = \frac{4\pi}{3} N_D r_c^3 = 2{,}7 \pm 0{,}1,$$

de aquí se deduce que

$$r_c = (0{,}865 \pm 0{,}015)\, N_D^{-1/3} \simeq 1{,}39 r_D. \qquad (4)$$

CONEXIÓN DE LA RESISTIVIDAD

Conforme a lo dicho en el capítulo 12, el esqueleto del racimo infinito puede ser representado en forma de una rejilla de alambre

tridimensional (véase la fig. 44), con una distancia entre los nudos del orden del radio de correlación. Para dicho problema debemos considerar que cada alambre consta de muchas bolas enlazadas por medio de resistencias, la expresión (1) del capítulo 12 ha de ser escrita de la forma siguiente:

$$R(r') = r_D \left(\frac{r_D}{|r' - r_c|} \right)^{\nu}. \quad (5)$$

La expresión (5) se convierte en magnitud infinita en el umbral de percolación, además, de acuerdo con la idea de universalidad, el índice crítico ν es igual que en los demás problemas tridimensionales de la teoría de percolación ($\nu = 0,8 \dots 0,9$). Lejos del umbral, cuando $r' - r_c$ es del orden de r_D, el radio de correlación adopta un valor del orden de r_D.

Cuando $r' = r_c$ la distancia entre los nudos de la red del racimo infinito se convierte en magnitud infinita. El racimo infinito en este punto tiene aún una densidad nula. Pero cuando $r' > r_c$ el mismo forma una especie de canales que atraviesan todo el sistema y aseguran una resistividad finita.

Continuemos el procedimiento de intercalación de resistencias. Si éstas se intercalan entre donadores con distancias de r_c a $r_c + g a_B^*$, donde g es cierto número menor que la unidad (por ejemplo, $g = 0,2$), entonces la máxima resistencia intercalada, prácticamente no cambiará, ya que $e^{(2r_c/a_B^*) + 2g} \simeq e^{2r_c/a_B^*}$. Por otra parte, el racimo infinito representará una red con una distancia entre los nudos del orden de

$$R_c = r_D \left(\frac{r_D}{g a_B^*} \right)^{\nu}. \quad (6)$$

En la teoría de electroconductibilidad a saltos, tal red se llama *crítica*. Precisamente ella es la responsable del paso de la corriente eléctrica.

En efecto, el aumento ulterior de la variable r', es decir, la intercalación de las demás resistencias, no conducirá a un cambio considerable de la resistividad. Como se deduce de la fórmula (3), las resistencias con $r - r_c \gg a_B^*$ son mucho mayores que las resistencias con $r = r_c$. Por eso, de hecho, a través de dichas resistencias la corriente eléctrica, a pesar de todo, no pasará, prefiriendo la red crítica cuyas resistencias máximas son iguales a

$$\mathscr{R}_{\text{máx}} = \mathscr{R}_0 e^{2r_c/a_B^*}.$$

Así pues, nos queda calcular la resistividad de la rejilla crítica. Al igual que hemos hecho en el capítulo 12, representemos esa

rejilla en forma de la armadura de una red cúbica sencilla (fig. 12) cuyo período constituye R_c.

Cada alambre que une dos nudos inmediatos de la red consta de gran número de resistencias iniciales conectadas en serie, las cuales se determinan mediante la fórmula (3). Como esas resistencias se distinguen muchísimo una de otra, la resistencia de un alambre debe considerarse igual a la resistencia máxima de las resistencias que integran ese alambre, es decir, debe ser igual a $\mathscr{R}_{\text{máx}}$. El cubo elemental de la red cúbica sencilla (fig. 27) consta de cuatro alambres conectados en paralelo, además, también cada alambre pertenece a otros cuatro cubos, así que a cada cubo le corresponde un alambre de resistencia $\mathscr{R}_{\text{máx}}$. Para obtener la resistividad es necesario multiplicar la resistencia completa del cubo $\mathscr{R}_{\text{máx}}$ por el área de su cara (R_c^2) y dividirla entre la longitud de la arista (R_c). Por lo tanto,

$$\rho_0 (N) = \mathscr{R}_{\text{máx}} R_c = \mathscr{R}_0 R_c e^{2r_c/a_B^*}. \qquad (7)$$

En este caso obramos con el cubo como si estuviera lleno de una sustancia homogénea de resistividad ρ. Pero precisamente así procede el experimentador cuando calcula la resistividad de la muestra a partir de la resistencia completa medida. El experimentador no piensa en si la corriente eléctrica es homogénea en su muestra, o si la misma fluye por cualesquier hilos. Si la muestra tiene forma de cubo, para obtener la resistividad, el experimentador debe multiplicar la resistencia completa por la longitud de la arista del cubo.

ANÁLISIS DEL RESULTADO OBTENIDO

Al calcular la resistencia que enlaza dos donadores (fórmula (3)) no hemos tomado en consideración el hecho de que las energías de los electrones en dichos donadores podrían ser distintas. La diferencia surge, en primer lugar, a causa de que las impurezas cargadas generan entre los referidos donadores cierta diferencia de potenciales electroestáticos, la cual tiene signo aleatorio y valor aleatorio. La ley de conservación de la energía no permite en este caso la unión a efecto de túnel de un donador a otro, si ésta no va acompañada del aumento o la disminución de la energía (en el valor necesario) a expensas de la interacción del electrón con los átomos de la red que realizan oscilaciones térmicas. Como ya fue dicho, la probabilidad de obtener la energía ε es proporcional a $e^{-\varepsilon/kT}$. Por esta razón, en realidad, la resistencia $\mathscr{R}(r)$ depende de la temperatura. El registro sucesivo de

esta dependencia conduce a que la resistividad dependa de la temperatura según la ley (1), donde la energía de activación $\varepsilon = \varepsilon(N)$ depende de la concentración de impurezas. El cálculo que nos ha conducido a la fórmula (7) fue hecho suponiendo que la temperatura es tan grande que $\varepsilon(N)/kt \ll 1$. Por lo tanto, la fórmula (7) sólo proporciona la variable $\rho_0(N)$ y no la resistividad completa.

Es necesario tener en cuenta que distintas partes de la fórmula (7) fueron obtenidas con distinto grado de precisión. El factor $\mathscr{R}_0 R_c$, llamado *factor preexponencial*, se ha obtenido con una precisión de hasta el coeficiente numérico. Efectivamente, en realidad, por ejemplo, no sabemos el número g en la expresión (6) para R_c. Además, la sustitución de la rejilla del racimo infinito por una red periódica puede conducir a un error en el coeficiente numérico. Cabe señalar que en la actualidad *no existe una teoría* que permita determinar con certeza el coeficiente numérico en el mencionado factor preexponencial.

En cuanto a la variable que figura en el exponente de la fórmula (7), ésta se conoce con bastante precisión. Según el sentido de la deducción de la fórmula (7), en el exponente, r_c podría sustituirse por $r_c + a_B^* g$.

Entonces, en vez de $2r_c/a_B^*$ surgiría la suma $\frac{2r_c}{a_B^*} + 2g$. Su segundo miembro caracteriza, de hecho, la indeterminación con que conocemos el referido exponente. Como ya fue dicho, con pequeñas concentraciones de donadores, $2r_c/a_B^* \gg 1$, por eso el error relativo es pequeño. De hecho, este último refleja la indeterminación del coeficiente numérico en el factor preexponencial.

COMPARACIÓN CON LOS DATOS EXPERIMENTALES

Precisamente por medio del exponente se determina la dependencia entre la resistividad ρ_0 y la concentración de donadores N_D. De acuerdo con las fórmulas (4) y (7),

$$\ln \rho_0(N) = \ln \mathscr{R}_0 R_c + \frac{2 \cdot 0{,}86}{N_D^{1/3} a_B^*} \ln e. \qquad (8)$$

El primer miembro del segundo término (8) depende de N_D mucho menos que el segundo miembro, y el mismo puede ser considerado como una magnitud constante. La comparación de la

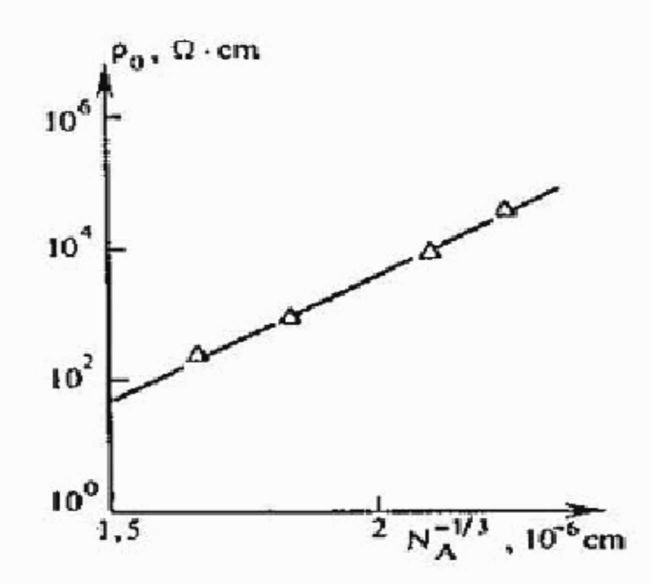


Fig. 51. Dependencia entre el logaritmo de resistencia $\rho_0(N)$ y la concentración de aceptores en el silicio de tipo *p*. La línea recta es el resultado teórico (8), y Δ son los datos experimentales *Ray* y *Fan* obtenidos.

fórmula (8) con los datos experimentales, ejecutada para muchos semiconductores, ha mostrado que dicha fórmula describe con mucha precisión la dependencia entre ρ_0 y N, lo cual es un logro importante de la teoría expuesta más arriba. En la figura 51 se ofrece la resistencia $\rho_0(N)$ para un semiconductor bien estudiado—el silicio. La recta representa el resultado teórico (8), y los triángulos, el resultado del experimento. Se ve que el acuerdo entre la teoría y el experimento no deja nada que desear.

El procedimiento descrito en este capítulo también se emplea con éxito para hallar la dependencia entre la temperatura y la electroconductibilidad a saltos, así como la variación de esta última en función del campo magnético exterior y de una serie de otros parámetros. Además, este procedimiento es aplicable a cualquier sistema heterogéneo cuya resistencia cambia de punto a punto en amplios límites.

Capítulo 14
CONCLUSIÓN

En este último capítulo analizaremos brevemente algunas aplicaciones de la teoría de percolación que no entraron en los capítulos anteriores, pero que nos parecen interesantes, y haremos el resumen de todo lo dicho, tratando de determinar lo que tienen de común todos los problemas analizados.

Percolación del líquido por un laberinto. Este problema está estrechamente enlazado con el problema de penetración del gas en una máscara de carbón, el cual dio comienzo a la teoría de percolación. Imagínense un cuerpo poroso en el que bajo presión se inyecta líquido. Este último no humedece el cuerpo, así que las fuerzas capilares obstaculizan su penetración en los poros.

El laberinto de tubos capilares atraviesa todo el cuerpo, pero los diámetros de esos tubos se diferencian mucho entre sí. En unos lugares los tubos son anchos, y en otros, estrechos.

Al principio supongamos que el cuerpo sólo tiene un tubo capilar cilíndrico. A la izquierda del cuerpo *1* hay líquido bajo cierta presión creada por el émbolo *2*, y a la derecha del cuerpo hay aire bajo presión atmosférica (fig. 52). El cuerpo permanece fijo y no puede moverse. A expensas de la tensión superficial, el líquido no humectante penetrará en el tubo capilar sólo en el caso de que su presión supere la presión atmosférica en $2\sigma/R$, donde R es el radio del tubo capilar, y σ, el coeficiente de presión surerficial. A menores presiones el líquido forma un menisco convexo, pero no pasa por el tubo capilar.

Ahora supongamos que en el cuerpo existen tubos capilares de distintos radios. Con un valor dado de la presión del líquido, algunos de esos tubos (los más anchos) dejan pasar el líquido, mientras que otros (los más estrechos) no lo dejan pasar. Con el incremento de la presión aumenta el número de tubos capilares que dejan pasar el líquido. A pequeñas presiones, cuando sólo dejan pasar el líquido los tubos capilares más gruesos, el líquido no puede penetrar en el cuerpo más allá de la capa superficial. Pero bajo cierta presión crítica los tubos capilares permeables forman un sistema que atraviesa todo el sólido. A partir de dicha presión el líquido se infiltra en el sólido.

El cálculo de tal presión, así como de una serie de otras características del proceso, constituye una aplicación muy importante de la teoría de percolación desde el punto de vista de las necesidades prácticas.

Formación de geles poliméricos. El polímero es una micromolécula que consta de un gran número de unidades

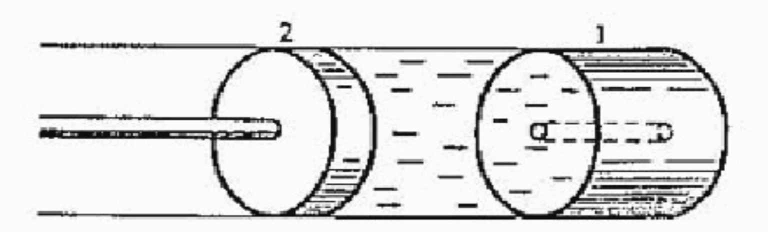


Fig. 52.

elementales (monómeros). Los monómeros que se encuentran en la solución pueden enlazarse entre sí formando una rejilla tridimensional compuesta, la cual atraviesa todo el sistema. Como resultado se forma un *gel*, es decir, un medio consistente que recuerda la gelatina o la jalea.

Existe un modelo que describe satisfactoriamente la formación del gel. El mismo se reduce a la teoría de percolación donde los nudos blancos son moléculas monómeras, y los nudos negros, moléculas del disolvente. Los enlaces entre los nudos blancos se realizan con una probabilidad que depende de la temperatura. La formación de un racimo infinito de nudos blancos enlazados corresponde a la aparición del gel.

Tal problema de la teoría de percolación se denomina problema mixto, ya que tanto los nudos como los enlaces son elementos aleatorios. Supongamos que la probabilidad de que cierto nudo sea blanco es igual a x_1 (esa probabilidad equivale a la concentración de moléculas del monómero), en tanto que la probabilidad de que un enlace dado no esté roto es igual a x_2. Hay que hallar la zona de los valores de x_1 y x_2 en la que existe un racimo infinito de nudos blancos enlazados uno con otro.

Según la definición, x_1 y x_2 cambian en el intervalo de cero a la unidad.

Si $x_2 = 1$, es decir, si todos los enlaces son íntegros, el racimo inifinito existirá para todos valores de x_1 en la zona de $x_{nud} \leqslant \leqslant x_1 \leqslant 1$, donde x_{nud} es el umbral de percolación del problema de los nudos. Si $x_1 = 1$, es decir, si todos los nudos son blancos, para la existencia de un racimo infinito será necesaria la condición $x_{en} \leqslant x_2 \leqslant 1$, donde x_{en} es el umbral de percolación del problema de los enlaces.

El cuadrado en la figura 53 incluye toda la zona de cambio de las variables x_1 y x_2. La curva continua representa el gráfico de la

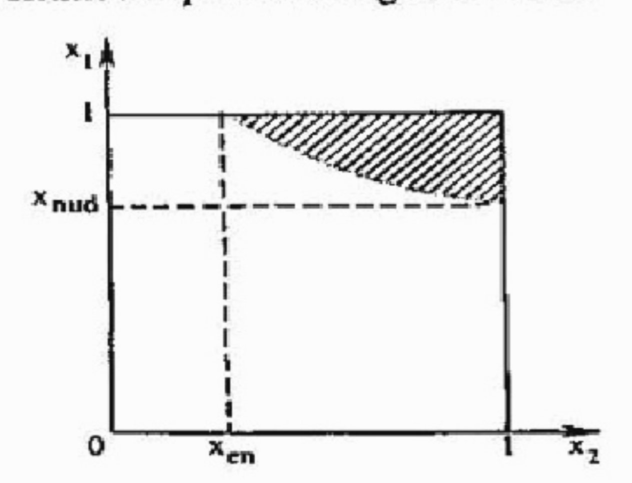


Fig. 53.

función $x_{min}(x_2)$ que describe el límite de la zona de existencia de un racimo infinito. Con cada valor de x_2 en el intervalo de $x_{en} < x_2 < 1$, la función $x_{min}(x_2)$ proporciona el valor mínimo de x_1 con el que existe un racimo infinito. Es fácil comprender que $x_{min}(1) = x_{nud}$ y $x_{min}(x_{en}) = 1$. La propia zona de existencia del racimo infinito en la figura 53 está rayada.

Si la probabilidad de x_2 ha sido establecida para todos los valores de la temperatura, entonces, valiéndose de la función $x_{min}(x_2)$, puede ser hallada la zona de temperaturas y de concentraciones del monómero, en la que se forma el gel.

¿QUÉ ES, PUES, LA TEORÍA DE PERCOLACIÓN?

En ninguna parte de este libro ha figurado la definición de lo que es teoría de percolación. No es fácil expresar tal definición. No obstante, intentemos ahora, en la última página del libro, formular lo que tienen de común todos los problemas aquí examinados, y cuál es, en realidad, el objeto de la teoría de percolación.

La teoría de percolación estudia las relaciones entre un gran número (macroscópico) de elementos, a condición de que el enlace de cada uno de ellos con sus vecinos tenga carácter aleatorio, pero que sea establecido con arreglo a un procedimiento absolutamente determinado (por ejemplo, mediante un generador de números aleatorios dotado de propiedades concretas).

Los diversos problemas de la teoría de percolación pueden ser agrupados por el hecho de que los elementos enlazados en las cercanías del umbral de percolación tienen igual geometría. Para notarla es necesario distraer la atención de la estructura a pequeña escala, determinada por el carácter de enlaces y las propiedades de los elementos, prestando atención tan sólo a los enlaces de los grandes bloques. La geometría universal a gran escala, dicta las propiedades universales de las variables físicas que dependen de la estructura de los grandes racimos. Precisamente esto agrupa los problemas de la teoría de percolación que difieren tanto uno de otro.

LITERATURA PARA EL ESTUDIO DETALLADO DE LA TEORÍA DE PERCOLACIÓN

1. D. Stauffer. Scaling theory of percolation clusters. Phys. Reports v. 54 p. 1, 1979.
2. Disordered systems and localization ed. by C. Castellani, C. Di Castro and L. Petiti. Lecture Notes in Physics, v. 149 Springer-Verlag, 1982.
3. Percolation Structures and Processes ed. by G. Deutscher, R. Zallen, J. Adler. Annals of the Israel Physical Society v. 5.
4. B. I. Shklovski, A. L. Efrós. Electronic properties of doped semiconductors. Springer-Verlag 1984, chapter 5.

RESPUESTAS Y SOLUCIONES

Capítulo 1

1. Con arreglo a la regla general, para hallar el valor medio hay que multiplicar cada valor posible de la variable aleatoria, por la probabilidad de este valor, y después sumar todos los productos. La probabilidad de que cualquiera de las caras del cubo permanezca dirigida hacia arriba es igual a $^1/_6$. Por consiguiente,

$$\bar{a} = (^1/_6)\cdot 1 + (^1/_6)\cdot 2 + (^1/_6)\cdot 3 + (^1/_6)\cdot 4 + $$
$$+ (^1/_6)\cdot 5 + (^1/_6)\cdot 6 = {}^{21}/_6.$$

2. Los resultados de los experimentos cambian, pero el valor medio de $x_c(\mathcal{N})$, calculado a base de muchos experimentos, no varía, ya que el movimiento de izquierda a derecha se realiza, por término medio, con la misma probabilidad que de arriba abajo. Respectivamente, tampoco cambia $x_c = \lim\limits_{\mathcal{N}\to\infty} x_c(\mathcal{N})$.

3. Designemos por x_i' y x_i los valores de umbral obtenidos en el experimento anotado con el número i, teniendo en cuenta que x_i' corresponde a la nueva definición del umbral, y x_i, a la definición vieja (de izquierda a derecha). Si a medida que disminuye x, al principio desaparece la percolación de izquierda a derecha y luego de arriba abajo, entonces $x_i' = x_i$. Pero si eso sucede al revés, entonces $x_i' > x_i$. El valor medio del umbral según la nueva definición es igual a

$$x_c'(\mathcal{N}) = \frac{x_1' + x_2' + \dots + x_Q'}{Q},$$

mientras que según la definición vieja

$$x_c'(\mathcal{N}) = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_Q}{Q}.$$

En ambas fórmulas el número completo de experimentos Q se considera muy grande. Pero con gran número de experimentos, las situaciones cuando $x_i' > x_i$ surgirán inevitablemente. Por esta razón, $x_c'(\mathcal{N}) > x(\mathcal{N})$. Sin embargo,

$$\lim_{\mathcal{N}\to\infty} x_c'(\mathcal{N}) = \lim_{\mathcal{N}\to\infty} x_c(\mathcal{N}) = x_c.$$

El hecho es que el umbral de percolación en un sistema infinito no es una variable aleatoria, sino una magnitud cierta, la cual no cambia de un experimento a otro. Al mismo tiempo, la diferencia de los umbrales de percolación en distintas direcciones es un fenómeno aleatorio. Por término medio, desde el punto de vista de la percolación, todas las direcciones son equivalentes. Por eso x_c no depende de la dirección.

4. La solución es análoga a la anterior.

Designemos por x''_i y x_i los valores de umbral obtenidos en el experimento anotado con el número *i*, teniendo en cuenta que x''_i corresponde a la nueva definición del umbral, y x_i, a la definición vieja. Es fácil demostrar que $x''_i \leqslant x_i$. Razonando como en el problema anterior, obtenemos

$$x''_c(\mathcal{N}) < x_c(\mathcal{N}), \text{ pero } \lim_{\mathcal{N}\to\infty} x''_c(\mathcal{N}) =$$

$$= \lim_{\mathcal{N}\to\infty} x_c(\mathcal{N}) = x_c.$$

5. El cálculo según la fórmula (8) da $\delta = 0{,}01$. Esto significa que las desviaciones "típicas" del valor medio son iguales a $\pm 0{,}01$. De aquí se desprende que el último signo en el número 0,59 obtenido por B. P. Watson y P. L. Leath con bastante probabilidad, pudo resultar erróneo. Con una probabilidad mucho menor también pudo resultar erróneo el primer signo. Puesto que sólo se hizo un experimento, los propios autores sólo pudieron apreciar el error con el que ellos determinaron el umbral de percolación utilizando la sucesión de los nudos bloqueados. (Esa sucesión constituyó $\pm 0{,}005$.) Sin embargo, los autores nada pudieron decir de cómo cambiará el resultado al repetir el experimento con otra sucesión aleatoria. Las investigaciones ulteriores, en cuyo programa entraron muchos experimentos con un solo valor de $\mathcal{N}$, así como experimentos con grandes valores de $\mathcal{N}$, condujeron a la deducción de la fórmula (8). Esos experimentos también han mostrado que, por lo visto, el número 0,59 es correcto incluso en su último signo, lo que en sumo grado debe considerarse como un hecho de suerte.

Capítulo 2

1. La porción de nudos bloqueados equivale a $1 - x = \mathcal{N}'/\mathcal{N}$, mientras que la porción de nudos no bloqueados equivale a $x = (\mathcal{N} - \mathcal{N}')/\mathcal{N}$. Si elegimos aleatoriamente Q nudos, entre ellos resultarán Qx nudos no bloqueados y $Q(1 - x)$ bloqueados (cuanto mayor sea el número Q, tanto más exactamente se cumplirá esta relación). Por eso la probabilidad de que el nudo elegido aleatoriamente resulte bloqueado es igual a $Q(1 - x)/Q = 1 - x$, y la probabilidad de que ese nudo resulte no bloqueado equivale a $Qx/Q = x$. Puesto que el nudo puede ser ora bloqueado, ora no bloqueado, la suma de las probabilidades es igual a la unidad: $1 - x + x = 1$.

2. La probabilidad de cualquiera sucesión de los tres números fijados equivale a $^1/_6 \cdot {}^1/_6 \cdot {}^1/_6 = {}^1/_{216}$. El número de distintas sucesiones que satisfagan las condiciones planteadas para los números 1, 2 y 3 es igual a 6 (123; 213; 321; 231; 132 y 312), y para los números 1, 2 y 2 es igual a 3 (122; 212 y 221). La probabilidad de que se realice una de las posibles sucesiones, equivale a la suma de probabilidades. Por consiguiente, en el primer caso, la probabilidad buscada constituye $6 \cdot {}^1/_{216} = {}^1/_{36}$, y en el segundo caso, $3 \cdot {}^1/_{216} = {}^1/_{72}$.

3. $(0{,}8)^3 \cdot (0{,}9)^4 = 0{,}336$.

4. La solución no se expone.

5. La función de distribución de la variable aleatoria *a* es una constante en el intervalo $(-1, 1)$ y equivale a cero fuera de este intervalo (fig. 54). Como el área completa de un rectángulo, limitada por la curva $f(y)$ (en este caso, por una recta horizontal), el eje de abscisas y las

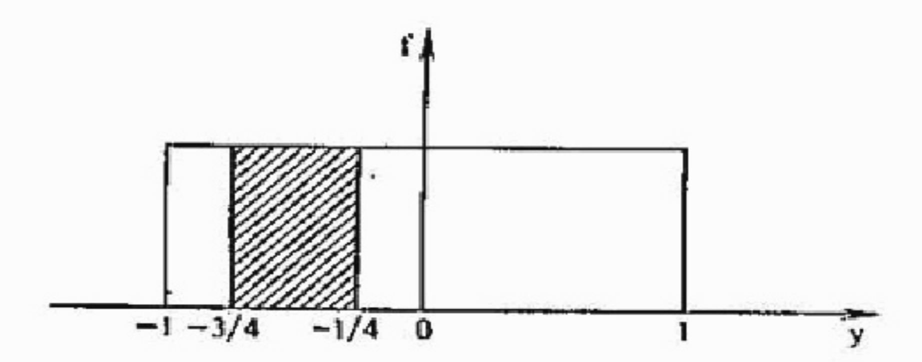


Fig. 54.

perpendiculares levantadas en los puntos -1 y 1, debe equivaler a la unidad, $f(y) = {}^1/_2$ cuando $-1 < y < 1$. Por regla general, la probabilidad buscada equivale al área del rectángulo, limitada por la recta $f(y)$, el eje de abscisas y las perpendiculares levantadas en los puntos $y = -{}^3/_4$ e $y = -{}^1/_4$. (En la fig. 54 ese rectángulo está rayado.) La probabilidad es igual a $[-{}^1/_4 - (-{}^3/_4)] \cdot {}^1/_2 = {}^1/_4$.

6. La variable y recorre cualesquier valores de $-\infty$ a ∞. Por esta razón, en las fórmulas (3) y (4) hay que poner $A = -\infty$ y $B = \infty$. De acuerdo con la fórmula (3),

$$\bar{a} = \int_{-\infty}^{\infty} y f_{\mathcal{N}}(y) dy.$$

Sustituyendo la fórmula (6) obtenemos

$$\bar{a} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \delta_{\mathcal{N}}^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} y \exp(-y^2/2\delta_{\mathcal{N}}^2) dy.$$

Bajo el signo de integral se encuentra una función impar. Tras sustituir la variable $y = -t$ y comparar el resultado con la fórmula inicial, notamos que $\bar{a} = -\bar{a}$. De aquí se deduce que $\bar{a} = 0$.

De acuerdo con la fórmula (4), la varianza

$$\delta^2 = \int_{-\infty}^{\infty} y^2 f_{\mathcal{N}}(y)\, dy =$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \delta_{\mathcal{N}}^{-1} \int_{-\infty}^{\infty} y^2 \exp(-y^2/2\delta_{\mathcal{N}}^2)\, dy.$$

Sustituyamos la variable: $y = \sqrt{2}\,\delta_{\mathcal{N}} t$. En este caso

$$\delta^2 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \delta_{\mathcal{N}}^2 \int_{-\infty}^{\infty} t^2 e^{-t^2} dt.$$

La integral respecto a t equivale a $\sqrt{\pi}/2$. Por eso obtenemos $\delta^2 = \delta_{\mathcal{N}}^2$.

Capítulo 3

1. Según la definición, $P(1) = 1$. Cuando los valores de x son próximos a la unidad, los nudos pueden no pertenecer al racimo infinito por dos motivos:

a) En ellos puede haber átomos no magnéticos. La porción de tales nudos constituye $1 - x$.

b) Los átomos magnéticos pueden permanecer aislados del racimo infinito como, por ejemplo, el átomo B en la figura 9. Pero para valores de x próximos a la unidad, cuando hay pocos átomos no magnéticos, esta causa es menos importante, puesto que para tal aislamiento es preciso que varios átomos no magnéticos (4 en el caso de la red plana mostrada en la fig. 9) se reúnan en torno a un átomo. Con un número pequeño de átomos no magnéticos, la probabilidad de tal acontecimiento también es pequeña. Por eso la segunda causa puede ser omitida, considerando que la porción de átomos pertenecientes al racimo infinito equivale simplemente a la porción de átomos magnéticos. Así pues, a condición de que $1 - x \ll 1$, tenemos $P(x) = x$.

2. En una red cúbica sencilla, cada átomo tiene 6 átomos inmediatos situados, respecto a ese átomo, en dirección de las aristas del cubo (fig. 12). La probabilidad W_0 de que todos los átomos inmediatos a cierto átomo sean átomos no magnéticos, equivale al producto de seis probabilidades: $W_0 = (1 - x)^6$. La probabilidad W de que por lo menos uno de esos átomos sea magnético equivale a

$$W(x) = 1 - W_0 = 1 - (1 - x)^6.$$

De acuerdo con la fórmula (2) del capítulo 3,

$$P_2(x) = xW(x) = x\left[1 - (1 - x)^6\right].$$

Cuando $x \ll 1$,

$$P_2(x) \approx 6x^2.$$

Es fácil darse cuenta que para cualquier red en la que cada átomo tiene z átomos inmediatos,

$$P_2(x) = x\left[1 - (1 - x)^z\right],$$

y cuando $x \ll 1$,

$$P_2(x) = zx^2.$$

3. En la figura 55 se muestran 12 átomos situados en la periferia del átomo 0. Todos ellos pueden participar en la formación de un racimo de

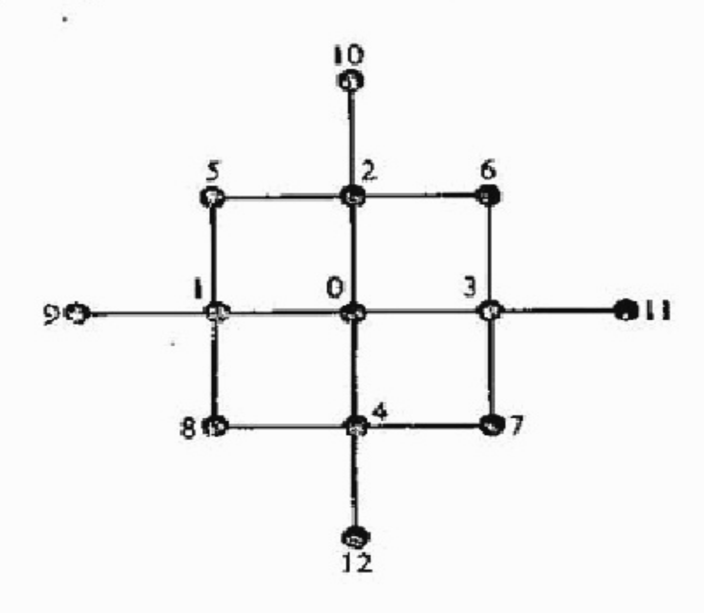


Fig. 55.

tres átomos. Tal racimo puede ser formado, por ejemplo, por los átomos *1*, *0* y *2*, si los tres son magnéticos. La probabilidad de tal acontecimiento equivale al producto de tres probabilidades: $x \cdot x \cdot x = x^3$. La probabilidad de que el racimo sea formado por los átomos *0*, *4* y *12* o por cualesquier otros tres átomos, también equivale a x^3.

Antes que nada es necesario saber cuántos grupos de tres átomos existen en realidad. Al principio contaremos la cantidad de esos grupos que contienen los átomos *0* y *1*. Estos contienen 6 grupos de tres átomos: *015*; *018*; *019*; *103*; *102* y *104*.

Ahora pasemos a los grupos de tres átomos que incluyen los átomos *0* y *3*, pero que no incluyen el átomo *1*. Esos grupos son cinco: *036*; *03 11*; *037*; *203* y *304*.

Análogamente hay cuatro grupos de tres átomos que incluyen los átomos *0* y *2*, pero que no incluyen los átomos *1* y *3*: *025*; *026*; *02 10*; *204*, así como tres grupos de tres átomos que incluyen los átomos *0* y *4*, pero que no incluyen los átomos *1*, *2* y *3*. Esos grupos son *047*; *048* y *04 12*.

Así pues, existen $6 + 5 + 4 + 3 = 18$ grupos de tres átomos, además, la probabilidad de cada uno de ellos equivale a x^3. Es necesario hallar la probabilidad de que surja por lo menos uno de esos grupos. Cuando $x \ll 1$, los acontecimientos que consisten en el surgimiento de uno de los grupos de tres átomos, pueden ser considerados como acontecimientos incompatibles. En efecto, la probabilidad de que se formen simultáneamente los grupos *102* y *015* de tres átomos, equivale a la probabilidad de que los *cuatro* átomos *0125* sean magnéticos, es decir, de que se forme un racimo de *cuatro* átomos. La probabilidad de este acontecimiento equivale a $x^4 = x^3 \cdot x \ll x^3$. Por consiguiente, cuando $x \ll 1$, los grupos de tres átomos pueden ser considerados como incompatibles. Entonces la probabilidad de que se forme por lo menos uno de ellos es igual a la suma de las probabilidades, y

$$P_3 = 18x^3.$$

4. La probabilidad de que el átomo elegido al azar pertenezca a un racimo integrado por no menos de dos átomos, puede ser representada en forma de la suma de las probabilidades de los acontecimientos incompatibles:

$$P_2(x) = P_3(x) + \bar{P}_2(x), \tag{1}$$

donde $\bar{P}_2(x)$ es la probabilidad de que el átomo pertenezca a un racimo de dos átomos. De aquí se deduce:

$$P_3(x) = P_2(x) - \bar{P}_2(x). \tag{2}$$

La función $P_2(x)$ se determina mediante la fórmula (3) del capítulo 3 y, por consiguiente, sólo es preciso calcular $\bar{P}_2(x)$.

El átomo *0* (fig. 55) puede formar un racimo de dos átomos con los átomos *1*, *2*, *3* ó con el átomo *4*. La probabilidad de que el racimo sea formado por los átomos *0* y *1* equivale a la probabilidad de que esos dos átomos sean magnéticos, multiplicada por la probabilidad de que los átomos *2*, *3*, *4*, *8*, *9* y *5* no sean magnéticos, es decir, equivale a $x^2(1-x)^6$. Esas mismas probabilidades son típicas de los acontecimientos que consisten en que el racimo de dos átomos está formado por los átomos *0* y *2* o por los átomos *0* y *3* o por los átomos *0* y *4*. Todos esos acontecimientos son incompatibles y, por lo tanto, la probabilidad $P_2(x)$ es igual a la suma de cuatro probabilidades:

$$P_2(x) = 4x^2(1-x)^6. \tag{3}$$

Sustituyendo la fórmula (3) en la (2), obtenemos

$$P_3(x) = x[1-(1-x)^4] - 4x^2(1-x)^6, \tag{4}$$

lo cual precisamente contribuye a la resolución del problema planteado.

Valiéndose de la fórmula del binomio es fácil mostrar que la expresión (4) no contiene términos cuya potencia x sería inferior a la tercera potencia. Si $x \ll 1$, entonces $P_3(x) \approx 18x^3$, lo cual coincide con el resultado del ejercicio anterior.

Capítulo 4

1. 0,0085; 0,0072; 0,0051; 0,0026; 0,0006; 0,0000; 0,0000 ... 0,0067; 0,0044; 0,0019; 0,0003; 0,0000; 0,0000 ... 0,0032; 0,001; 0,0001; 0,0000; 0,0000 ...

2. El número b consta, en efecto, de n signos. Por eso $b < 10^n$. Para obtener el siguiente número b' es necesario hallar b^2, dividirlo entre 10^n y tomar la parte integra. Por lo tanto, $b' < b^2/10^n$. Pero $b^2/10^n = b \cdot (b/10^n)$. Como $(b/10^n) < 1$, por lo tanto, $(b^2/10^n) < b$. De aquí se deduce que $b' < b$, lo cual precisamente era necesario demostrar.

3. 5, 15, 5, 15, 5, 15 ...

4. 5, 16, 9, 8, 5, 16, 9, 8, 5 ...

5. 5, 17, 13, 1, 5, 17, 13, 1, 5 ...

6. Por doquier no se cumple la condición *b*. En el ejercicio 3, $c = 0$, en el ejercicio 5 tampoco se cumple la condición *a*, etc.

7. Supongamos que $X_0 = 0$. En este caso obtenemos 0, 3, 1, 4, 2, 0, 3, 1, 4, 2 ... Con cualquier valor de X_0 el número X_1 coincide con uno de los números de esta sucesión.

8. En la figura 4 se ofrece la función de distribución de los números aleatorios que proporciona el generador. El juego V se compone de esos números. La porción de nudos no bloqueados en el juego V equivale a la porción de números aleatorios en dicho juego, que satisfacen la desigualdad $V < t$. Por consiguiente, la porción media de nudos no bloqueados es igual a la probabilidad de que el número aleatorio resulte menor que t. Según la definición de la función de distribución, esta probabilidad es igual a la superficie limitada por la curva $f(v)$, el eje de abscisas y las perpendiculares levantadas de los puntos 0 y t. En este caso esa superficie es el área del rectángulo, igual a t. Por consiguiente, la porción media de nudos no bloqueados x equivale a t.

Capítulo 5

1. Con valores de x próximos a la unidad, casi todos los nudos pertenecen al racimo infinito. A éste no pertenecen tan sólo los nudos que tienen rotos todos los enlaces que unian esos nudos con el sistema restante. La probabilidad de que esté roto un enlace determinado, es igual a $1 - x$. En el caso de una red cuadrada, para que un nudo resulte aislado del sistema es necesario que estén rotos cuatro enlaces que salen de ese nudo (fig. 56, *a*). La probabilidad de tal acontecimiento equivale al producto de las probabilidades, es decir, equivale a $(1-x)^4$. Para que dos nudos permanezcan aislados del sistema es preciso que estén rotos seis enlaces (fig. 56, *b*). La probabilidad de tal acontecimiento equivale a $(1-x)^6$.



Fig. 56. *a*) Un nudo aislado; *b*) dos nudos aislados. El enlace completo se muestra con una línea llena, y los enlaces rotos, con líneas de trazos.

Cuando $1 - x \ll 1$, esta probabilidad es mucho menor que la probabilidad de que permanezca aislado un nudo. Por lo tanto, en el caso límite que nos interesa, es posible considerar que todos los nudos aislados se hallan dispuestos de uno en uno, y la probabilidad de que el nudo elegido al azar esté aislado, equivale a $(1 - x)^4$. La probabilidad de que el nudo elegido al azar no esté aislado es igual a $1 - (1 - x)^4$, es decir, para una red cuadrada,

$$P^{en}(x) = 1 - (1 - x)^4.$$

Razonando del mismo modo obtenemos que para una red triangular

$$P^{en}(x) = 1 - (1 - x)^6,$$

mientras que para una red hexagonal

$$P^{en}(x) = 1 - (1 - x)^3.$$

Estos resultados son justos cuando $(1 - x) \ll 1$.

2. El problema se resuelve del mismo modo que el problema anterior. Cuando $1 - x \ll 1$, casi todos los nudos pertenecen al racimo infinito. El nudo elegido al azar permanecerá aislado del racimo infinito, en caso de que todos los nudos inmediatos a él contengan átomos no magnéticos (para evidenciar utilizamos la terminología del problema de la sustancia ferromagnética). Al igual que en el problema anterior, es insignificante la probabilidad de que uno de los nudos inmediatos al nudo sometido a examen sea el átomo magnético, pero aislado del racimo infinito. Por eso sólo es suficiente calcular la probabilidad de que todos los nudos inmediatos a dicho nudo sean átomos no magnéticos. La probabilidad de que en cierto nudo se encuentre un átomo no magnético equivale a $1 - x$. El número de nudos inmediatos es igual al número de enlaces que salen de dicho nudo. Por eso se obtienen los mismos resultados que en el ejercicio anterior:

para un retículo cuadrado $P^{nud}(x) = 1 - (1 - x)^4$;

para un retículo triangular $P^{nud}(x) = 1 - (1 - x)^6$;

para un retículo hexagonal $P^{nud}(x) = 1 - (1 - x)^3$.

Por lo tanto, con valores de x próximos a la unidad, $P^{nud}(x) = P^{en}(x)$, lo cual no contradice la fórmula (2).

3. Examinemos el retículo hexagonal cuya porción de enlaces blancos constituye x, y el retículo triangular cuya porción de enlaces blancos constituye y. (Recordemos que el término "enlace blanco" es sinónimo del término "enlace íntegro", y que "enlace negro" significa "enlace roto". El término nudo "está enlazado" con otro nudo, si eso no fue estipulado especialmente, ha de entenderse de tal modo que dicho nudo se halla

enlazado por medio de enlaces no rotos, es decir, mediante enlaces blancos.) Apliquemos los retículos uno sobre otro, así como se muestra en la figura 57. En este caso los nudos de los tipos A, B y C son comunes para ambos retículos, mientras que los nudos del tipo D pertenecen sólo al retículo hexagonal. La idea de los razonamientos posteriores consiste en que el problema de percolación en un retículo hexagonal puede ser reducido al correspondiente problema en un retículo triangular.

Las probabilidades de que los nudos A, B y C estén enlazados entre sí han de ser expresadas a través de la variable x, es decir, a través de la porción de enlaces blancos en el retículo hexagonal. En este caso es necesario utilizar la geometría y las propiedades estadísticas de los enlaces que salen de los nudos del tipo D. Después de esto es posible examinar tan sólo el retículo triangular representado en la figura 57 con líneas llenas, olvidando que dentro de cada triángulo hay líneas de trazos y nudos del tipo D.

Este procedimiento se utiliza ampliamente en el cálculo de circuitos eléctricos y se denomina "transformación de una estrella en un triángulo".

Realmente serán necesarias las siguientes magnitudes:

1) W_{--}, la probabilidad de que el nudo A no esté enlazado ni con el nudo B ni con el C. Tal probabilidad equivale a la suma de las probabilidades de dos acontecimientos incompatibles. El primer acontecimiento consiste en que el enlace AD es negro, mientras que los enlaces BD y DC son cualesquiera. Su probabilidad es igual a $1-x$. El segundo acontecimiento consiste en que el enlace AD es blanco, y ambos enlaces BD y BC son negros. La probabilidad de este acontecimiento equivale al producto de tres probabilidades: $x(1-x)(1-x)$. Como resultado

$$W_{--}(x) = 1 - x + x(1-x)^2. \qquad (1)$$

2) W_{+-}, la probabilidad de que el nudo A esté enlazado con el B, pero no con el C. Esta probabilidad equivale a la probabilidad de que los enlaces AD y DB sean blancos, y el enlace DC, negro, y se calcula como el producto de las probabilidades de tres acontecimientos:

$$W_{+-} = x^2(1-x). \qquad (2)$$

3) W_{-+}, la probabilidad de que el nudo A esté enlazado con el nudo C, pero no con el B. Es fácil convencerse de que esta probabilidad equivale a W_{+-}.

4) W_{++}, la probabilidad de que el nudo A esté enlazado tanto con el nudo B como con el C. Dicha probabilidad equivale a la probabilidad de

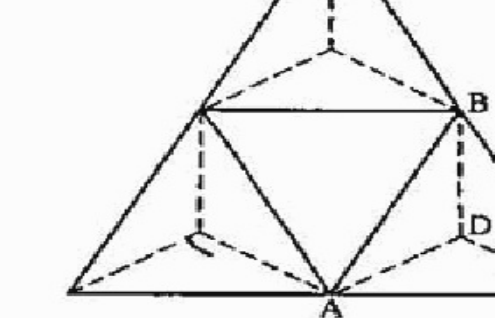


Fig. 57. Transformación de una estrella en un triángulo. Con líneas de trazos se muestra el retículo hexagonal, y con líneas llenas, el retículo triangular.

que los tres enlaces AD, DB y DC sean blancos, y se calcula como el producto de las probabilidades:

$$W_{++}(x) = x^3. \qquad (3)$$

Conociendo esas cuatro probabilidades es posible no volver más al retículo hexagonal y resolver el problema de percolación en un retículo triangular. Si fuera resuelto, sería hallado el valor crítico de x_{en} (H) para el retículo hexagonal.

Claro está que tal forma de resolver el problema no es más fácil ni mucho menos. Pero esas mismas probabilidades W pueden ser expresadas por la variable y, que es la porción de enlaces blancos en el retículo triangular. En el umbral de percolación estas probabilidades tienen un valor absolútamente determinado, el cual por ahora se desconoce, pero, tras igualar las probabilidades expresadas a través de x, a las probabilidades expresadas a través de y, se puede obtener la relación que enlaza los umbrales de los retículos hexagonal (x_{en}(H)) y triangular (x_{en}(T)).

Así pues, el siguiente problema consisté en expresar las cuatro probabilidades a través de y.

1) W_{--}. El nudo A no estará enlazado ni con B ni con C, si los enlaces AB y AC son negros, y el enlace BC es cualquiera. La probabilidad de tal acontecimiento equivale al producto de las probabilidades:

$$W_{--}(y) = (1 - y)^2. \qquad (4)$$

2) W_{+-}. El nudo A estará enlazado con el B, pero no con el C, si el enlace AB es blanco, y ambos enlaces BC y AC son negros:

$$W_{+-} = y(1 - y)^2. \qquad (5)$$

(Si, por ejemplo, el enlace BC fuera blanco, el nudo A permanecería enlazado con el nudo C por la vía ABC.)

3) $W_{-+} = W_{+-}$, al igual que en el caso anterior.

4) W_{++}. La probabilidad de que el nudo A esté enlazado con el B y con el C equivale a la suma de las probabilidades de los cuatro acontecimientos incompatibles. El primer acontecimiento consiste en que los tres enlaces AB, BC y AC son blancos. Su probabilidad equivale a y^3. Los otros tres acontecimientos consisten en que sólo un enlace de tres es negro. Por ejemplo, si el enlace negro es AB, el nudo A estará enlazado con el C a través del enlace blanco AC, y con el B, por la vía ACB. La probabilidad de cada uno de los tres acontecimientos equivale a $y^2(1 - y)$. Como resultado obtenemos que

$$W_{++}(y) = y^3 + 3y^2(1 - y). \qquad (6)$$

En el umbral de percolación todas las variables $W(x)$ deben ser iguales a $W(y)$. Por esta razón, surge el siguiente sistema de ecuaciones:

$$W_{--}(x) = W_{--}(y); \quad 1 - x + x(1 - x)^2 = (1 - y)^2, \qquad (7)$$

$$W_{+-}(x) = W_{+-}(y); \quad x^2(1 - x) = y(1 - y)^2, \qquad (8)$$

$$W_{++}(x) = W_{++}(y); \quad x^3 = y^3 + 3y^2(1 - y). \qquad (9)$$

Estas ecuaciones deben satisfacerse al sustituir $x = x_{en}$(H) e $y = x_{en}$(T). Además, los umbrales de percolación satisfacen la relación (23) del capítulo 5. De esta relación se deduce que $x_{en}(H) = 1 - x_{en}(T)$.

Sustituyamos en las ecuaciones (7), (8) y (9),

$$y = x_{en}(T), \quad x = 1 - x_{en}(T).$$

En este caso la ecuación (8) se convierte en la identidad

$$(1 - x_{en}(T))^2 x_{en}(T) =$$
$$= x_{en}(T)(1 - x_{en}(T))^2,$$

en tanto que las ecuaciones (7) y (9) se reducen a esa misma ecuación cúbica:

$$x_{en}^3(T) - 3x_{en}(T) + 1 = 0.$$

En el intervalo $0 \leqslant x_{en}(T) \leqslant 1$ esta ecuación tiene una sola raiz:

$$x_{en}(T) = 2\,\mathrm{sen}\,(\pi/18) \approx 0{,}347296.$$

Respectivamente,

$$x_{en}(H) = 1 - x_{en}(T) =$$
$$= 1 - 2\,\mathrm{sen}\,(\pi/18) \approx 0{,}652704.$$

4. Antes que nada hay que hallar el área correspondiente a un nudo en cada uno de los tres retículos mostrados en la figura 16, a condición de que la distancia entre los nudos inmediatos sea igual a a.

Retículo cuadrado. A cada cuadrado le pertenecen 4 nudos, pero cada uno de esos nudos pertenece a cuatro cuadrados diferentes. Por consiguiente, a cada cuadrado le queda un nudo o, con otras palabras, a cada nudo le pertenece el área de un cuadrado, es decir, $S(C) = a^2$.

Retículo triangular. A cada triángulo le pertenecen 3 nudos, pero cada uno de esos nudos es la propiedad de seis triángulos distintos. Por lo tanto, a un triángulo le corresponde la mitad de un nudo, y a un nudo le corresponde el área equivalente a dos áreas del triángulo. El área de un triángulo equilátero, de lado a, es igual a $\sqrt{3}a^2/4$. Por consiguiente, a un nudo le pertenece el área $S(T) = \sqrt{3}a^2/2$.

Retículo hexagonal. A cada hexágono le pertenecen 6 nudos, pero cada uno de esos nudos pertenece a tres distintos hexágonos. Por lo tanto, a un hexágono le corresponden dos nudos. El área del hexágono equivale al área de seis triángulos equilátreros, de lado a, es decir, equivale a $3\sqrt{3}a^2/2$. Por consiguiente, a cada nudo le corresponde el área $S(H) = 3\sqrt{3}a^2/4$.

Para cada uno de los retículos, la variable a se determina por medio de la función establecida $a(x)$, además, en calidad de x es preciso utilizar el umbral de percolación x_{en} para el correspondiente retículo. Como resultado obtenemos

$$S(T) = \frac{\sqrt{3}}{2}[a(0{,}35)]^2; \qquad S(C) = [a(0{,}5)]^2,$$

$$S(H) = \frac{3\sqrt{3}}{4}[a(0{,}65)]^2.$$

Está claro que la función $a(x)$ disminuye con el aumento de x. (Si los pares contagian mejor unos a otros, la distancia entre ellos disminuirá.) Es

fácil notar, sin embargo, que esta afirmación es insuficiente para obtener aunque sea una desigualdad entre las áreas escritas más arriba. En efecto, la longitud a del retículo hexagonal es mínima, pero, en cambio, el coeficiente numérico en la expresión para el área es máximo, y en el retículo triangular eso es al revés. Por esta razón, para calcular un retículo de área mínima hay que conocer la función $a(x)$ más detalladamente.

Capítulo 6

1. Los coeficientes de relleno de las redes planas se calculan fácilmente valiéndose de los resultados del ejercicio 4 dado en el capítulo 5. Eso fue demostrado en el texto en el ejemplo de una red hexagonal. Por eso aquí nos limitaremos únicamente a las redes volumétricas (tridimensionales), además, sólo a dos, dejando al lector que resuelva por su cuenta todo lo demás.

Red cúbica sencilla. A cada cubo elemental (fig. 12) le pertenecen 8 nudos, pero cada uno de esos nudos es propiedad de 8 diferentes cubos elementales. Por consiguiente, a cada cubo le pertenece un nudo, mientras que el volumen correspondiente a cada nudo equivale al volumen del cubo elemental, es decir, a a^3. El radio de las esferas circunscritas en entorno a los nudos constituye $a/2$, y el volumen, $4\pi a^3/24$. La porción de volumen ocupada por las esferas es igual a la relación entre el volumen de una esfera y el volumen correspondiente a un nudo. Por consiguiente, para la red CS,

$$f(\mathrm{CS}) = 4\pi/24 \approx 0{,}52.$$

Red cúbica centrada en el espacio. A cada cubo elemental (fig. 28, *b*) le pertenecen 9 nudos, de los cuales 8 se encuentran en los ángulos, y uno en el centro. El nudo situado en el centro pertenece sólo a un cubo, y cada uno de los nudos angulares pertenece a 8 cubos diferentes. Por lo tanto, a un cubo elemental le corresponden dos nudos, en tanto que el volumen correspondiente a un nudo equivale a la mitad del volumen del cubo, es decir, a $a^3/2$. El nudo inmediato a cada nudo permanece alejado de este último a una distancia equivalente a la mitad de la diagonal del cubo, es decir, a la distancia de $\sqrt{3}a/2$. El radio de la esfera circunscrita en torno a cada nudo equivale a $\sqrt{3}a/4$, y el volumen de la esfera equivale a $(4\pi 3^{3/2}/3 \cdot 64)\,a^3 = (\pi\sqrt{3}/16)\,a^3$. El coeficiente de relleno es igual a la relación entre el volumen de la esfera y el volumen correspondiente a un nudo. Por lo tanto,

$$f(\mathrm{CCE}) = \pi\sqrt{3}/8 \approx 0{,}68.$$

Capítulo 7

1. Al primer grupo de coordinación del nudo *0* pertenecen 12 nudos del tipo *1* (fig. 58), al segundo grupo, 6 nudos del tipo *2*, y al tercer grupo, 24 nudos del tipo *3* (en la figura no aparecen todos los nudos); $12 + 6 + 24 = 42$.

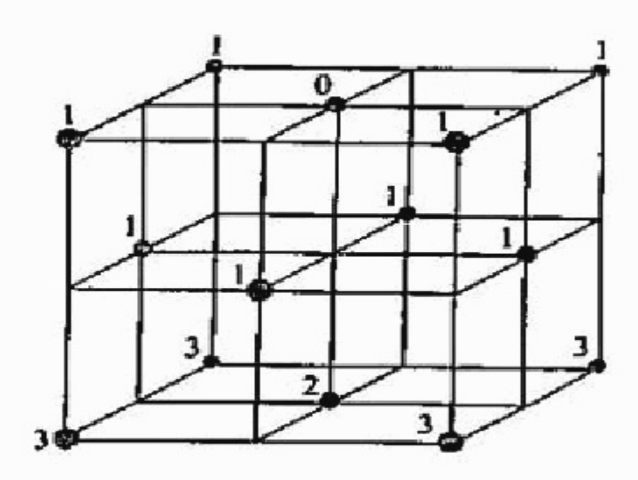


Fig. 58. Nudos inmediatos del nudo *0* en un retículo cúbico centrado con arreglo a las caras.

Capítulo 8

1. Utilizando las fórmulas (3) y (5) obtenemos $a_B^* = 636 \cdot 10^{-8}$ cm = = 636 Å, $N_c = 7{,}8 \cdot 10^{13}$ cm^{-3}. Esto constituye una baja concentración crítica única. La transición a la conductibilidad metálica ocurre cuando un átomo extrínseco corresponde a ¡10^8 átomos del semiconductor! Para obtener un semiconductor con tal concentración de impurezas se requiere una técnica muy complicada de depuración del cristal.

Capítulo 11

1. Introduzcamos la función $Q(x)$, es decir, la probabilidad de que la información acerca del nudo elegido al azar alcance tan sólo un número finito de otros nudos. Al igual que antes, $P(x) = 1 - Q$. De cada nudo salen q canales independientes, por los cuales se difunde la información. Hallemos la probabilidad de que uno de esos canales se interrumpa en cierta etapa. Eso puede ser el resultado de uno de dos acontecimientos incompatibles: *a*, primer enlace de este canal, resultó roto; *b*, primer enlace, resultó entero, pero el nudo a que él conduce es capaz de transmitir la información sólo a un número finito de otros nudos. La probabilidad del acontecimiento *a* equivale a $1 - x$, y la probabilidad del acontecimiento, *b* equivale a $xQ(x)$. Las probabilidades de los acontecimientos incompatibles pueden ser súmadas. Por esta razón, la probabilidad de que se interrumpa un canal es igual a $1 - x + xQ(x)$. Como todos los canales son independientes, la probabilidad de que todos ellos se interrumpan equivale a $[1 - x + xQ(x)]^q$.

De aquí se obtiene la ecuación para $Q(x)$:

$$Q(x) = [1 - x + xQ(x)]^q.$$

Sustituyendo $Q' = 1 - x + xQ$, dicha ecuación se reduce a la ecuación (4). Definitivamente obtenemos

$$P = \frac{(x - 1/q)\,2q^2}{q - 1}.$$

Notemos que los umbrales de percolación para el problema de los nudos y el problema de los enlaces en el retículo de Bethe son idénticos ($x_c = 1/q$).

Eso pudo ser dicho de antemano. En efecto, supongamos que el nudo a que conduce el enlace roto está bloqueado. Después de esto se puede admitir que todos los enlaces son íntegros, y del problema de los enlaces podemos volver al problema de los nudos. De aquí se deduce que los umbrales de percolación en estos problemas deben ser idénticos.

Capítulo 12

1. Es necesario calcular la resistencia del cubo cuya arista es de longitud unitaria. Al igual que antes, el número de alambres unidos paralelamente es igual a $1/R^2$, pero la longitud de cada alambre ya no equivale a la unidad. La misma supera la unidad un número de veces igual a la relación $(\mathcal{L}/R) = (x - x_c)^{-(\zeta - \nu)}$. Respectivamente, la resistencia de un alambre equivale no a ρ_0, sino a $\rho_0(x - x_c)^{-(\zeta - \nu)}$. Por esta razón, para obtener el resultado requerido es suficiente cambiar, en la fórmula (8), la magnitud ρ_0 que figura en la expresión para σ_3, en $\rho_0(x - x_c)^{-(\zeta - \nu)}$. Como resultado obtenemos

$$\sigma = \sigma_3 (x - x_c)^{\zeta + \nu},$$

donde $\sigma_3 = \rho_0^{-1} l^{-2}$. Por lo tanto, $t = \zeta + \nu$.